



DEVELOPPEMENT D'OUTILS NUMERIQUES ET EXPERIMENTAUX DEDIES A L'ETUDE DE L'EVAPORATION EN PRESENCE DE LIGNE TRIPLE

Loic Tachon

► To cite this version:

Loic Tachon. DEVELOPPEMENT D'OUTILS NUMERIQUES ET EXPERIMENTAUX DEDIES A L'ETUDE DE L'EVAPORATION EN PRESENCE DE LIGNE TRIPLE. Energie électrique. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2011. Français. NNT : . tel-00629921

HAL Id: tel-00629921

<https://theses.hal.science/tel-00629921>

Submitted on 11 Oct 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Aix Marseille Université
(Aix-Marseille I)
Institut Universitaire des **Systèmes Thermiques Industriels**
- UMR CNRS 6595 -

THÈSE
pour obtenir le grade de
DOCTEUR D'AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ
Discipline : Mécanique Énergétique
École Doctorale 353, Sciences pour l'Ingénieur
présentée par
Loïc Tachon
soutenance prévue le 14 avril 2011

**DEVELOPPEMENT D'OUTILS NUMERIQUES ET
EXPERIMENTAUX DEDIES A L'ETUDE DE
L'EVAPORATION EN PRESENCE DE LIGNE TRIPLE**

JURY

Rapporteurs :

Vincent S.,	Maître de conférence - Université de Bordeaux - Trefle
Miscevic M.,	Maître de conférence - Université Paul Sabatier Toulouse - LAPLACE

Examineurs :

Prat M.,	Directeur de recherche - CNRS - IMFT - Toulouse
Tadrist. L.,	Professeur - Université de Provence - IUSTI
Onofri F.,	Directeur de recherche - CNRS - IUSTI - Marseille

Directeur de thèse :

Guignard S.,	Maître de conférence - Université de Provence - IUSTI
--------------	---

Remerciements

Tout d'abord, Merci à toi Science! Ton existence nous stimule chaque jour pour mieux te connaître. Plus nous te connaissons plus tu nous séduis! Comment fais tu?

Je remercie tous les professeurs qui ont subi tes charmes et me les ont transmis tout au long de ma scolarité.

Je remercie tous les gens qui m'ont fait confiance en m'offrant la possibilité d'apporter ma pierre à cet édifice et particulièrement Mr Lounès Tadrist pour son accueil au sein du laboratoire et son suivi dans mes recherches sur une thématique qui lui tient à coeur.

Je témoigne également ma gratitude à Mr Marc Miscevic et Mr Stéphane Vincent pour avoir prêté un vif intérêt à ce document en acceptant le rôle de rapporteur. Mes remerciements s'adressent aussi à Mr Marc Prat et Mr Fabrice Onofri pour leur présence appréciée en tant que membres du Jury de cette thèse.

Je voue une profonde reconnaissance à Mr Stephan Guignard qui a dirigé ces travaux de thèse. Avide de transmettre, ton optimisme quotidien rend la créativité fertile. Merci pour ta disponibilité et la confiance que tu as eue en moi pour aborder les multi-facettes de ce vaste chantier.

Au cours de ce doctorat, j'ai également eu la chance de connaître la joie que pouvait procurer l'enseignement. C'est pourquoi je remercie les gens qui m'ont fait confiance pour cette tâche, en particulier Mr Jean-Vincent Daurelle puis Mrs Christophe Lenilot et Eric Daniel. Je salue particulièrement Christian Mariani, Chantal Pelcé et Irina Graour avec qui j'ai réellement apprécié de collaborer.

Je remercie aussi tous les chercheurs que j'ai côtoyés, dont je jalouse le savoir et qui m'ont grandement aidé face à mes nombreuses questions. Clin d'oeil spécial à Stéphane Launay, Bloen Metzger, Frederic Topin, Marc Médal, Magic Geoffroy, Fabrice Rigollet, Yann Jobic, Jean-Marie Felio, Christophe Sierra, Jérôme Vicente, Jérôme Duplat, Lazhar, Georges, Laurence, Ouamar, Nico, Fabien, David et tous ceux que j'oublie.

Merci à tout le personnel administratif avec une spéciale attention pour Mr Pascool Campion dont la sympathie et le professionnalisme sont sans égal.

Enfin, merci à tous les copains, les anciens : Manu, Seb, Damien, Rani, Abdel... Puis les contemporains : Guillaume, Mohamed, Selim, Kifah, Prashant, Jonhatan, Jean-Mi, Laurent, Yann, Pierrick, Sarah, Li Hua, Loic², Ben, Solaire2g and co et les autres ...

Attention spéciale à Etienne, Marcos, Julien et Floflo compagnons pour la vie, je ne m'attarde pas trop, on en reparlera!!

Pour finir, Merci à toi lecteur, nous allons discuter un petit peu!!!

Table des matières

Introduction générale	1
1 Problème axisymétrique de film en évaporation	9
1.1 Problème quasi axisymétrique de film en évaporation	11
1.2 Ingrédients physiques	17
1.3 Modélisation du problème	25
1.4 Quelques ordres de grandeurs relatifs aux trois étapes du processus d'évaporation du problème étudié	26
1.5 Conclusion	27
2 Méthode optique de reconstruction d'interface	31
2.1 Contexte scientifique	33
2.2 Description de la méthode	35
2.3 Validation de la méthode de reconstruction de l'interface	45
2.4 Résultats obtenus à l'aide de la méthode	66
2.5 Applications	69
2.6 Conclusion	71
3 Etude de la ligne triple	73
3.1 Introduction	74
3.2 Dispositif expérimental	75
3.3 Influence du substrat sur la vitesse de la ligne triple	79
3.4 Influence de la ligne triple sur l'évaporation	83
3.5 Conclusion	95
4 Méthode de suivi d'interface 3D	99
4.1 Contextes scientifiques	101
4.2 Etat de l'art	101
4.3 Méthode de suivi d'interface 3D	110

4.4	Architecture algorithmique de la méthode	128
4.5	Exemple : évaporation d'un film axisymétrique	130
4.6	Conclusion	132
5	Résultats numériques	133
5.1	Rappels mathématiques	134
5.2	Test de convergence spatiale	139
5.3	Test de convergence temporelle	145
5.4	Tests classiques de validation	148
5.5	Conclusion	155
	Annexes	163
.1	Algorithme de traitement d'images pour la détection de la position de la ligne triple	163
.2	Démonstration des formules de la méthode optique de reconstruction d'interface	166
.3	Méthode de projection à balayage dichotomique	170

Introduction générale

Ce mémoire présente la synthèse de ma contribution aux recherches sur les problèmes de changement de phase avec singularité. Dans cette introduction, nous présentons l'intérêt de ces recherches et les travaux qu'elles impliquent. Enfin, nous illustrerons la structure de ce rapport.

Motivations

Le Laboratoire *IUSTI* où ces recherches ont eu lieu, est spécialisé dans l'étude du changement de phase impliquant transfert de chaleur et de masse. L'enjeu est de taille car le transfert de chaleur par changement de phase permet de transférer une quantité considérable d'énergie, ce qui est très intéressant dans un contexte général d'amélioration des performances et de réduction des coûts des moyens de production d'énergie. Cependant, une bonne compréhension des mécanismes des transferts de masse et de chaleur à l'échelle locale s'impose afin de pouvoir les maîtriser et les exploiter dans un but d'optimisation industrielle.

Contexte général

Le processus d'évaporation est très présent dans la nature et exploité dans de nombreux procédés industriels tels la microélectronique, la soudure, les évaporateurs en couches minces, le séchage des peintures, le dépôt de particules et d'autres technologies utilisant le changement de phase liquide-vapeur. Ce type de transfert permet d'échanger de hauts flux de chaleur tout en évitant des températures trop élevées, ce qui est très intéressant pour le fonctionnement optimal des processeurs par exemple. Dans le domaine nucléaire, les écoulements diphasiques liquide/vapeur apparaissent dans le coeur du réacteur en situation accidentelle. L'assèchement du coeur peut engendrer sa fonte avec des conséquences catastrophiques. On comprend pourquoi une bonne maîtrise des mécanismes de changements de phase est cruciale pour son exploitation industrielle.

Le taux de transfert thermique pendant le processus d'évaporation est beaucoup plus grand que celui obtenu avec des techniques utilisant le refroidissement sans changement de phase. Cependant, les mécanismes physiques intervenant sont beaucoup plus compliqués en raison d'un fort couplage entre la diffusion de l'espèce dans le gaz, la dynamique du liquide, les propriétés du solide et le transfert thermique. Ceci fait que l'évaporation est un phénomène dont les mécanismes ne sont pas encore totalement compris. L'étude des gouttes en évaporation a suscité de nombreuses études eu sein du laboratoire dans le cadre d'expérience menées sur terre et en micro-gravité. Ce sujet, toujours d'actualité, a permis d'illustrer que la plupart de l'évaporation a lieu au niveau de la ligne triple, périmètre de la goutte en contact avec trois phases (liquide, solide, vapeur). Plus récemment, dans le cadre de programmes de recherche financés par l'agence nationale de la recherche (ANR), le laboratoire a élargi son champ d'étude sur l'évaporation en développant une thématique sur l'étude des films évaporatifs. L'objectif est de comprendre l'évaporation des films liquides en présence de ligne

triple ainsi que les mécanismes de rupture de film, qui apportent une difficulté supplémentaire au problème.

Face à une telle difficulté, la modélisation numérique est un outil indispensable. Au sein du laboratoire, la simulation diphasique des écoulements est un savoir faire acquis pour les écoulements compressibles. Toutefois, ces méthodes souffrent encore d'un problème de diffusion de l'interface. Or les interfaces, définies comme les frontières entre les phases, sont le siège de l'évaporation et la précision sur leurs descriptions géométriques est un point clef à la compréhension de ces phénomènes. C'est pourquoi, le laboratoire consacre un effort de développement important sur la modélisation numérique direct des interfaces. Celle-ci consiste à modéliser les écoulements diphasiques en tenant compte de la géométrie précise des interfaces. Dans cette approche, les interfaces sont traitées comme des discontinuités. Cette méthode est beaucoup plus fine que les modèles moyennés et permet le respect des mécanismes régissant la physique des interfaces.

Les travaux de cette thèse s'inscrivent donc dans une démarche visant à coupler approche numérique et expérimentale dans le cadre de l'étude des films en évaporation en présence de ligne de contact. Dans cette optique, une expérience simple, permettant de créer la naissance d'une ligne triple et d'étudier sa dynamique durant l'évaporation d'un film liquide a été mise en place. Cette expérience aide à la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu au cours de l'évaporation d'un film et sert de référence aux modélisations numériques tridimensionnelles dont le développement est encore balbutiant.

Problématique ciblée

Dans un écoulement diphasique, l'interface, définie comme étant la frontière entre deux phases (états de la matière), est une zone où certaines grandeurs physiques sont discontinues et les forces prenant la forme de Dirac posent de sérieux problèmes numériques. Pour parfaire la difficulté, ces forces sont fonction de la courbure de l'interface. **La précision de la description géométrique de l'interface est donc capitale.** De plus, ces interfaces sont en mouvement, parfois avec des dynamiques brusques et peuvent être amenées à changer de topologie. Enfin la dynamique des fluides est généralement tridimensionnelle.

Pour couronner le tout, au bord des interfaces se trouvent les lignes de contact, ou, autrement dit, les lignes triples. La ligne de contact constitue une singularité d'un ordre encore plus élevé que les interfaces : c'est une singularité linéique située au bord d'une singularité surfacique. Non seulement les grandeurs physiques n'y sont pas continues, ce qui pose des problèmes numériques, mais les modèles physiques les décrivant sont encore à l'étude. Or ces lignes de contact jouent un rôle essentiel dans le processus d'évaporation. L'angle de contact détermine en partie la géométrie des interfaces dans l'écoulement et le flux de chaleur au niveau de la ligne de contact peut représenter une part non négligeable du flux de chaleur total.

Ces difficultés, présentes dans les problèmes de film en évaporation en présence de ligne de contact, ont motivé le développement d'un modèle numérique bidimensionnel diphasique. Ce

modèle repose sur la description éléments finis des équations de conservation. L'interface, infiniment fine, est toujours constituée par les lignes du maillage du domaine d'étude. Ceci permet de traiter les interfaces comme des conditions limites. Celles-ci peuvent être issues de modèles théoriques ou déduites de résultats expérimentaux.

Les travaux réalisés durant ce doctorat ne portent pas sur la modélisation numérique mais plutôt sur les développements nécessaires à l'extension de ce projet. En outre, la nécessité de fournir des conditions limites au modèle numérique apparaît incontournable. Dans ce but, une méthode optique de suivi d'interface a été développée, permettant de mesurer la forme de l'interface d'un film liquide. A cela, s'ajoutent des travaux préliminaires permettant d'évaluer le flux de chaleur et de masse au voisinage de la ligne triple.

L'extension en trois dimensions du modèle de simulation numérique s'impose face à la physique tridimensionnelle de l'écoulement. Ceci posait une difficulté principale : l'extension en trois dimensions de la méthode de suivi d'interface. Cette tâche, coeur des travaux de cette thèse, consistait à développer une méthode de suivi d'interface d'ordre élevé utilisable dans de nombreuses configurations d'écoulements à interfaces.

Plan du mémoire

Ce mémoire s'articule en trois parties principales :

- La présentation du problème de film quasi axisymétrique en évaporation,
- La mise au point d'outils de mesure pour déterminer les conditions limites expérimentales :
 - développement d'une méthode optique de reconstruction d'interface de film liquide
 - étude des flux de chaleur et masse au voisinage de la ligne triple.
- Le développement d'une méthode de suivi d'interface numérique infiniment fine en trois dimensions.

Problème axisymétrique de film en évaporation

Dans le but de comprendre les problèmes de changements de phase en présence de ligne de contact, une expérience reproduisant l'évaporation d'un film axisymétrique a été mise en place. Cette expérience, très simple, a l'intérêt de réunir dans une même configuration différentes problématiques relatives au processus d'évaporation, à savoir : l'évaporation et la rupture d'un film liquide et la dynamique d'une ligne de contact en présence de changement de phase. Ces trois phénomènes apparaissent de façon séquentielle au cours de l'expérience ce qui offre la possibilité de mettre en évidence certains effets locaux propres aux lignes de contact.

Après une description du problème axisymétrique de film en évaporation, ce chapitre tente d'introduire les ingrédients physiques dominants dans ce problème.

Méthode expérimentale de suivi d'interface

L'étude des problèmes diphasiques implique la connaissance précise de la géométrie de l'interface. En effet, dans la considération où les interfaces sont traitées comme des discontinuités, celles-ci doivent être localisées et introduire des notions supplémentaires telles que la ligne triple et l'angle de contact. D'un point de vue expérimental, il est donc primordial de mesurer la forme d'une interface dans le cadre d'un problème à changement de phase.

Le problème axisymétrique de film en évaporation détaillé dans le chapitre 1 pose une difficulté expérimentale relative à la mesure de la forme de l'interface. La problématique, dans cette expérience, est que l'interface prend une forme concave interdisant toute mesure directe de sa géométrie de façon goniométrique. C'est pourquoi il a été nécessaire de mettre au point un outil de mesure indirecte afin de reconstituer la forme de la discontinuité.

Pour ce type de problème, les méthodes optiques sont appréciées de part leur caractère non intrusif. De ce fait, une technique de sondage laser de l'interface a été conçue et mise en place dans le but de déterminer le profil de l'interface liquide-gaz au voisinage de ligne triple, la position de celle-ci et l'angle de contact macroscopique qui en découle.

Ce chapitre explique le fonctionnement détaillé de la méthode développée et propose une validation ainsi qu'une quantification de sa précision sur un ménisque étalon à géométrie connue.

Etude de la ligne triple

Cette partie, loin d'être une affaire classée, est à interpréter de façon plus qualitative que quantitative en raison du temps imparti. L'idée initiale était d'illustrer, par une approche extrêmement simple, en quoi le problème décrit dans le chapitre 1 est intéressant pour l'étude des transferts au voisinage de la ligne triple. En effet, la mesure des flux de masse et de chaleur locaux est expérimentalement difficile de part le caractère microscopique de la zone d'action. Le concept consiste à exploiter le changement de topologie de l'interface intervenant dans notre problème pour calculer de façon déductive les transferts de masse et de chaleur au voisinage de la ligne de contact.

Après l'étude de l'influence de quelques paramètres relatifs à la nature du substrat sur la cinétique de l'évaporation, une méthode permettant la mise en évidence des effets de ligne triple est illustrée. Cette approche repose sur des hypothèses dont la validité n'est pas affirmativement vérifiée. Toutefois, les résultats préliminaires obtenus sont très encourageants et confortent notre intérêt pour le problème. Nous présentons les résultats expérimentaux les plus pertinents permettant de donner au moins un ordre de grandeur sur la mesure des flux de chaleur et de masse au voisinage de la ligne de contact.

Méthode numérique de suivi d'interface

Si les premières parties du mémoire sont nettement orientées vers l'aspect expérimental du problème étudié, la modélisation de celui-ci est au coeur de nos préoccupations. Il ressort de l'analyse physique du problème que l'interface et les lignes de contact en sont l'origine. Or la solution d'un problème se trouve en son origine. Par conséquent, la précision sur la description géométrique de l'interface est le fondement des modèles numériques en cours de développement.

Dans ce chapitre, nous proposons une méthode de suivi d'interface en trois dimensions dans laquelle la précision sur la description de cette discontinuité se veut optimale car celle-ci fait partie intégrante du domaine d'étude. Les algorithmes de la méthode sont détaillés. L'intégration de celle-ci dans un modèle prenant en compte les équations de conservation n'est pas encore d'actualité, toutefois, le dernier chapitre illustre le potentiel de la méthode au travers des tests classiques de validation relatifs au suivi d'interface.

Description du problème

Chapitre 1

Présentation du problème axisymétrique de film en évaporation

Sommaire

1.1	Problème quasi axisymétrique de film en évaporation	11
1.1.1	Présentation du problème	11
1.1.2	Conditions expérimentales	14
1.1.3	Physique globale du problème	15
1.2	Ingrédients physiques	17
1.2.1	Les interfaces ou discontinuités	17
1.2.2	La tension superficielle	19
1.2.3	Mouillabilité d'un fluide et angle de contact macroscopique	20
1.2.4	Ligne triple et singularités	22
1.2.5	Les effets Marangoni	23
1.2.6	Effet gravitaire	24
1.3	Modélisation du problème	25
1.4	Quelques ordres de grandeurs relatifs aux trois étapes du processus d'évaporation du problème étudié	26
1.4.1	Etape 1 : avant l'apparition de la ligne triple	26
1.4.2	Etape 2 : rupture du film, naissance de la zone sèche	27
1.4.3	Etape 3 : démouillage évaporatif	27
1.5	Conclusion	27

Dans la thématique de recherche du laboratoire IUSTI sur les changements de phases et les interfaces, l'étude des films en évaporation et des lignes de contacts dynamiques représentent des axes de recherche nouveaux et prometteurs. C'est pourquoi une nouvelle expérience a été mise en place dans le but de servir d'éléments de validation, de comparaison ou de conditions

limites aux simulations numériques en cours de développement.

La présentation du problème constitue l'objet de ce chapitre. Nous essaierons également de comprendre l'ensemble et la complexité des mécanismes physiques pilotant le processus. Cette démarche nous permettra de mettre en lumière quelles conditions limites à la simulation les expériences pourraient nous fournir.

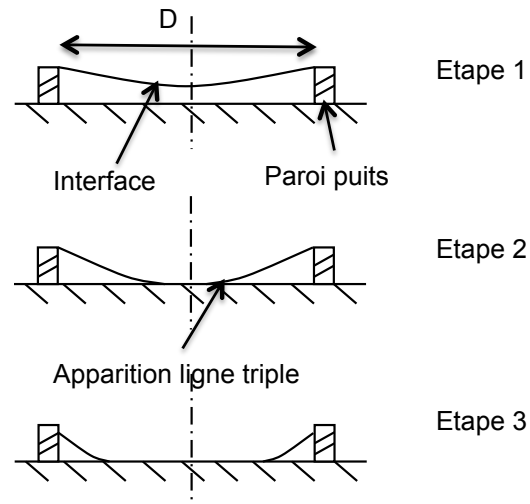
1.1 Problème quasi axisymétrique de film en évaporation

L'idée de l'expérience est de recréer l'évaporation d'un film de liquide volatil axisymétrique contenue dans un puits cylindrique. Au cours du processus d'évaporation, le film va se rompre, donnant naissance à une ligne triple et un ménisque axisymétrique. Le processus d'évaporation étant toujours actif, la ligne triple est dynamique jusqu'à l'évaporation totale du liquide.

1.1.1 Présentation du problème

Le problème axisymétrique de film en évaporation consiste à étudier l'évaporation d'un film liquide contenu dans une cavité cylindrique appelée puits d'évaporation déposé sur un substrat de nature connue. L'évaporation du film nécessite un apport de chaleur. Un volume contrôlé de liquide est déposé dans le puits cylindrique axisymétrique, puis le processus d'évaporation se décompose en trois étapes principales :

- **Etape 1 :** Selon la quantité initiale de liquide, l'interface liquide-gaz se creuse en son centre puis prend une forme toroïdale ou prend directement une forme toroïdale délimitant un film axisymétrique avec le substrat et la paroi du puits.
- **Etape 2 :** L'épaisseur du film au centre étant quasiment nulle, une zone sèche apparaît en son centre donnant ainsi naissance à une rupture de film.
- **Etape 3 :** Une fois le film rompu, on assiste à un processus de démouillage par évaporation avec la croissance de la zone sèche.



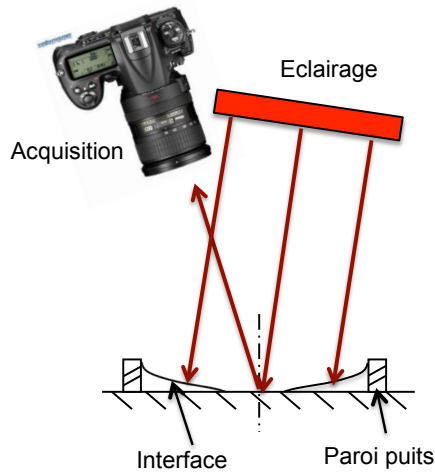
Ce problème à géométrie simple permet l'étude expérimentale de l'évaporation d'un film liquide, de la rupture d'un film liquide et de la dynamique de la ligne triple dans le cadre d'un problème piloté par le changement de phase.

La ligne triple que l'on cherche à étudier dans ce problème est celle située au niveau du substrat prenant forme à partir de l'étape 2 du processus d'évaporation. La seconde ligne triple située au niveau de la paroi du puits ne sera pas étudiée et l'on considérera ses effets négligeables sur le processus d'évaporation. Afin de rendre cette hypothèse crédible, il faut considérer les parois du puits d'évaporation comme étant infiniment fines. Par conséquent le stockage énergétique de celles-ci est infiniment faible.

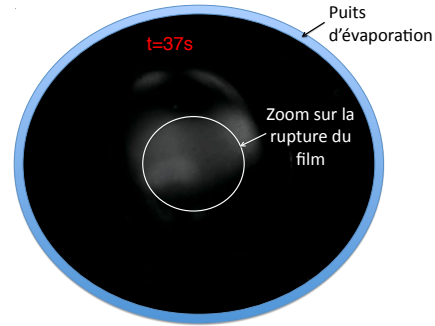
Ce problème s'avère être particulièrement intéressant pour l'étude de la ligne triple centrale. En effet, outre le fait qu'il permet de la faire apparaître, une des spécificités de ce problème est

qu’au cours de l’étape 3 du processus d’évaporation, le périmètre de la ligne triple augmente tandis que la surface de l’interface ou celle en contact avec le substrat diminue. Cela permet de mettre en exergue les effets de ligne triple sur le processus d’évaporation lorsque l’on a uniquement accès à des informations globales sur le plan expérimental telle que la masse à l’aide d’une balance ou le flux de chaleur à l’aide d’un flux mètre. Les informations sur le débit d’évaporation issues de l’étape 1 permettent de quantifier une densité de flux d’évaporation qui peut être étendue à l’étape 3. Nous verrons dans le chapitre 3 en quoi cette approche peut être une façon de quantifier les flux de chaleur et de masse au voisinage de la ligne triple.

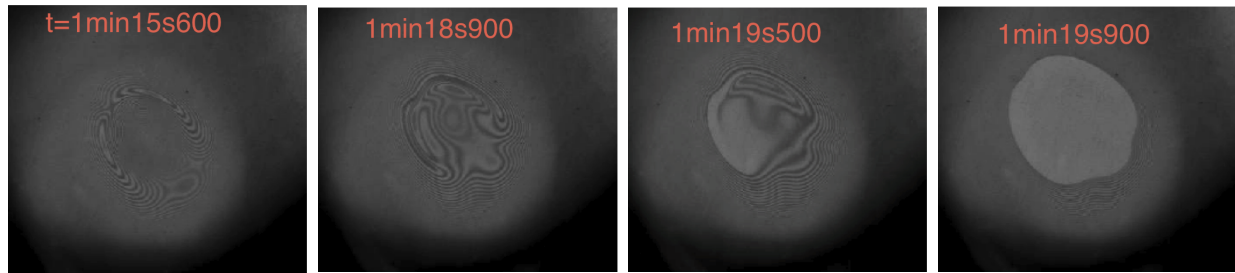
La figure 1.1 représente les trois étapes du processus d’évaporation d’une expérience du problème axisymétrique de film en évaporation. Les images sont réalisées avec une caméra visible en niveaux de gris et prises au dessus de la cellule d’évaporation.



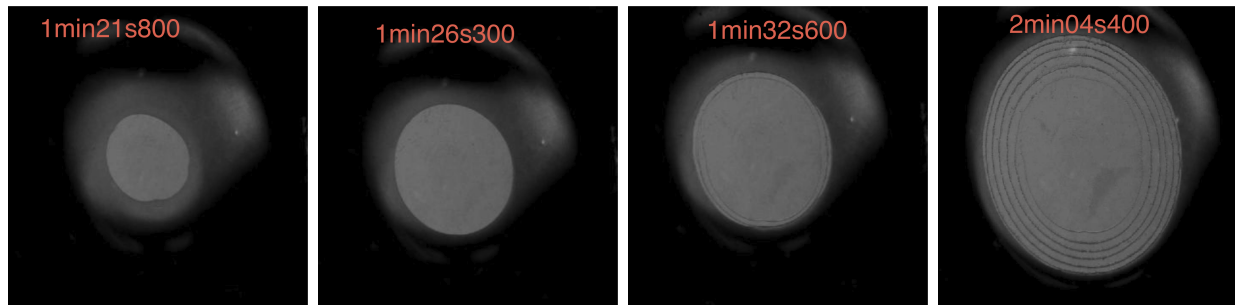
(a) Schéma expérimental



(b) Vue de dessus avant l'apparition de la ligne triple



(c) Vue de dessus pendant l'apparition de la ligne triple, zoom sur la rupture du film. Ici le substrat est en verre et son épaisseur est de 0,1 mm. L'apparition des franges d'interférences témoigne des épaisseurs micrométriques de film. Avec des substrats plus épais, ces franges apparaissent moins longtemps et la zone sèche est quasiment instantanément créée.



(d) Vue de dessus après l'apparition de la ligne triple. Juste après la rupture du film, la vitesse de la ligne triple, initialement importante, décroît rapidement pour se stabiliser au bout de 10 secondes. Une fois stabilisée, on observe un dépôt de microparticules résiduelles très ordonné.

FIGURE 1.1 – Processus d'évaporation du problème axisymétrique de film en évaporation avec du HFE_{7100}

Les images des figures 1.1(c) illustrent que la rupture de film est un processus instable. Ce phénomène est rapide. Il y a brusquement un transfert d'énergie superficielle en énergie

cinétique. Des franges d'interférences apparaissent, témoignant les très faibles épaisseurs du film avant sa rupture. Une méthode d'interférométrie basée sur l'exploitation de ces franges d'interférence est en développement. Celle-ci permettra la mesure des épaisseurs de film avant et pendant la rupture de celui-ci à une précision de l'ordre de la centaine de nanomètres. Ces méthodes ont déjà été exploitées sur des micro gouttes [Fondecave \(1997\)](#).

Les figures 1.1(d) illustrent l'évolution circulaire de la zone sèche illustrant le recul de la ligne de contact.

1.1.2 Conditions expérimentales

Dans ces expériences, l'évaporation se fait de façon naturelle sans chauffage de la paroi, l'expérience étant laissée à l'air libre sans confinement. L'évaporation est donc essentiellement initiée par la diffusion massique dans la phase vapeur.

Un puits cylindrique d'une hauteur de $1,5\text{ mm}$ est fermé à sa base par un substrat solide à très faible rugosité (verre, ZnSe, aluminium poli-miroir). L'étanchéité entre le puits et le substrat est obtenue grâce à un dépôt de résine. La paroi du puits est réalisée à l'aide d'une section de paille cylindrique alimentaire (polymère à base de polyéthylène) coupée sur une hauteur de $1,5\text{ mm}$. La faible épaisseur de plastique, inférieur à $50\text{ }\mu\text{m}$, nous permet de justifier l'hypothèse de paroi "*infiniment fine*". De plus, la conductivité est de $0,3\text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$, ce qui fait que le puits est un mauvais conducteur de chaleur. Le diamètre du puits d'évaporation est typiquement de 6 ou 7 mm. Ce diamètre est de l'ordre de quelques fois les longueurs capillaires des fluides utilisés.

Le substrat peut être de différentes natures : du verre, de l'aluminium ou du Zinc Selenide (ZnSe). Son épaisseur peut également varier afin de modifier le stockage thermique de celui-ci. Les épaisseurs utilisées sont 3 mm , 1 mm et $100\text{ }\mu\text{m}$. Les substrats sont assez grands pour que la surface soit considérée comme infinie.

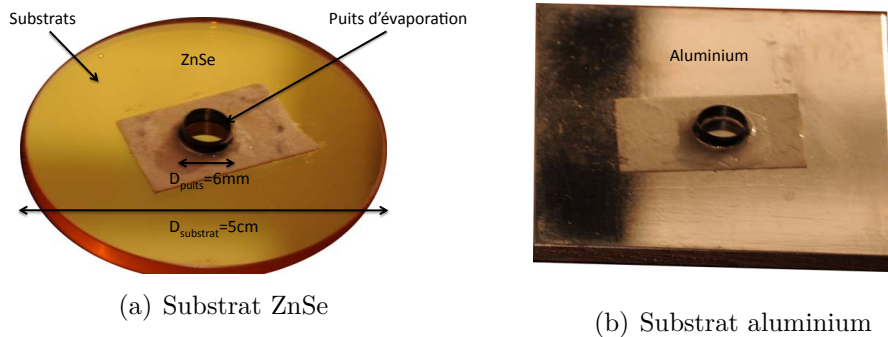


FIGURE 1.2 – Exemples de cellules d'évaporation avec leurs substrats

Le fluide utilisé est un fluide volatil tel que le HFE_{7100} . Ce fluide a la particularité d'avoir une faible température d'ébullition (61°C), ce qui fait qu'il s'évapore rapidement à l'air libre. Sa tension superficielle est basse (HFE_{7100} : 13 mN.m^{-1} , eau : 72 mN.m^{-1}) et il est très mouillant sur les substrats utilisés. D'autres fluides tels que les alcools et l'eau peuvent être utilisés, le processus d'évaporation est alors plus long.

Le volume de fluide utilisé est généralement de 50 ou 25 μl , ce qui est assez pour décrire les trois phases du processus d'évaporation.

La durée approximative du processus d'évaporation avec le HFE_{7100} est de l'ordre de 2 minutes pour une quantité initiale de 25 μl . Le temps d'attente entre deux expériences, pour retrouver les conditions initiales, dépend de la réactivité thermique du substrat. Pour le verre, substrat dont la réactivité thermique est la plus faible, une durée de 5 minutes est suffisante pour le retour à la température ambiante.

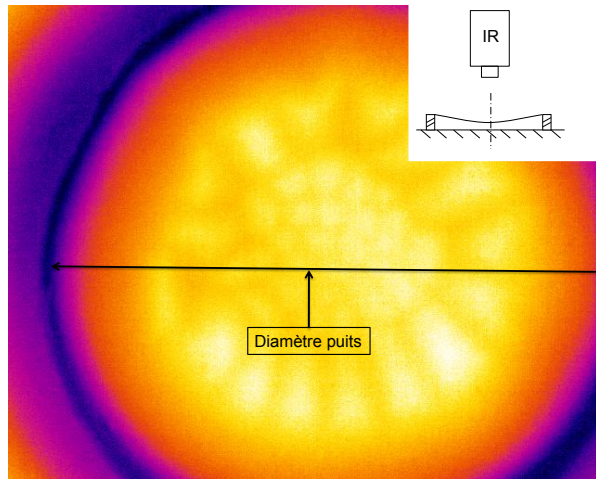
1.1.3 Physique globale du problème

Dans ce problème, le processus d'évaporation est principalement gouverné par la diffusion moléculaire au niveau de l'interface. En effet, si il existe un volume de gaz au dessus d'un liquide, les molécules de liquide vont diffuser dans l'espèce gazeuse tant qu'un équilibre n'est pas atteint. Cet équilibre est défini par la pression de vapeur saturante. Celle-ci dépend fortement de la température.

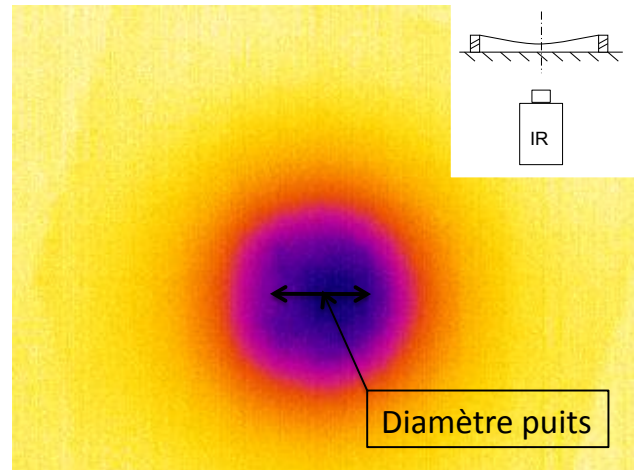
Ainsi, tant que la pression partielle de vapeur de l'espèce dans le gaz n'est pas égale à la pression de vapeur saturante, et qu'elle est inférieure à la pression ambiante, les molécules diffusent au niveau de l'interface en passant de l'état liquide à l'état gazeux.

Cette diffusion a un coût énergétique. Le système doit fournir la chaleur nécessaire au passage de l'état liquide à l'état gazeux. Cette énergie est puisée dans la matière qui entoure l'interface qui devient ainsi un puits de chaleur. Cela tend à abaisser la température de l'interface liquide-gaz. Les mécanismes de diffusion de l'espèce au niveau de l'interface sont donc fortement couplés avec les mécanismes thermiques du système. Ainsi des gradients thermiques apparaissent au sein du fluide, sur son interface et au niveau du substrat solide provoquant la mise en mouvement de celui-ci à cause des effets Marangoni thermiques ou gravitaires et donnent ainsi naissance à des structures convectives tridimensionnelles (figure 1.3).

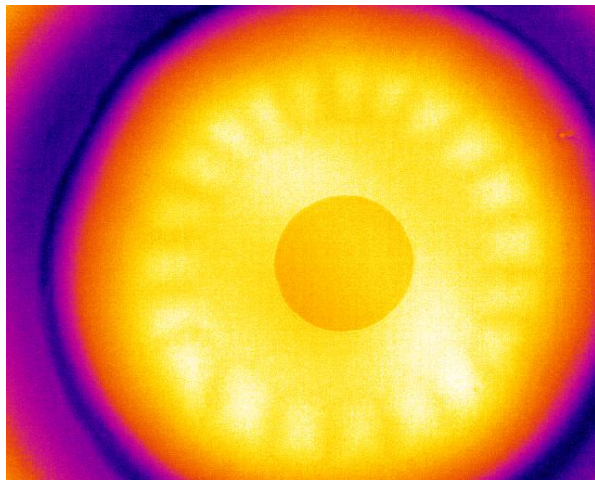
On a donc un système très complexe dans lequel diffusion moléculaire, transfert thermique et mécanique des fluides diphasiques sont fortement couplés à l'image de la figure 1.3.



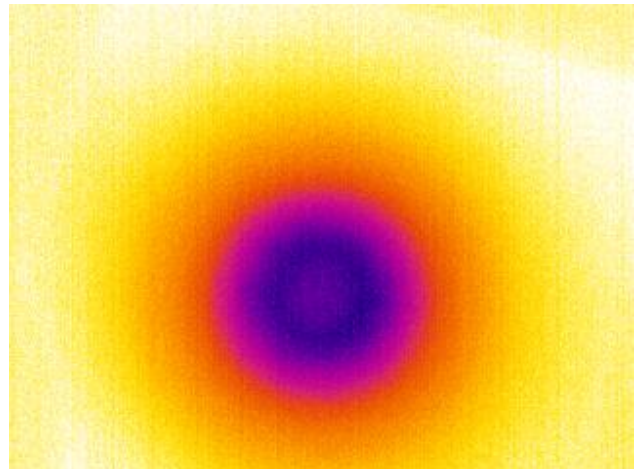
(a) Vue de dessus avant l'apparition de la ligne triple. La caméra filmant en vue de dessus est sensible aux longueurs d'ondes comprises entre 3 et 5 μm .



(b) Vue de dessous avant l'apparition de la ligne triple. La caméra filmant en vue de dessous est sensible aux longueurs d'ondes comprises entre 8 et 12 μm .



(c) Vue de dessus après l'apparition de la ligne triple. Des structures convectives organisées sont clairement visibles. Les différentes couleurs représentent la température apparente corps noir de l'image observée.



(d) Vue de dessous après l'apparition de la ligne triple. Le réchauffement central semble être l'empreinte de la zone sèche. Pour cet exemple, le substrat est du verre dont l'épaisseur est 0,1 mm.

FIGURE 1.3 – "Variation thermique du système", structures convectives (fluide utilisé : HFE_{7100})

Ces images ont été obtenues à l'aide de deux caméras infrarouges, l'une filmant le processus d'évaporation au-dessus du puits et l'autre filmant le problème au-dessous mesurant ainsi la température de la face inférieure du substrat. La caméra filmant au-dessus est de bien meilleure résolution.

On constate un refroidissement conséquent du substrat dont l'amplitude dépend de l'épaisseur de celui-ci ainsi que de sa conductivité. Le réchauffement central, visible sur la figure 1.3(d) semble être l'empreinte de la zone sèche.

La caméra infrarouge filmant le processus par dessus met clairement en évidence l'apparition de structures convectives organisées. Nous avons observé que l'organisation de ces structures évolue au cours du processus d'évaporation et dépend très probablement de l'épaisseur du film.

1.2 Ingrédients physiques

On va tenter ici de déterminer les ingrédients physiques intervenant dans ce problème et de comprendre comment ils interfèrent entre eux.

De façon générale, le processus d'évaporation peut se voir comme la combinaison du processus de vaporisation à l'interface et d'un ou plusieurs processus de transport s'effectuant au sein des phases liquide et gazeuse en présence. Dans de très nombreuses situations le processus limitant est le transport si bien qu'il est classique de considérer que l'interface liquide vapeur est localement à l'équilibre thermodynamique.

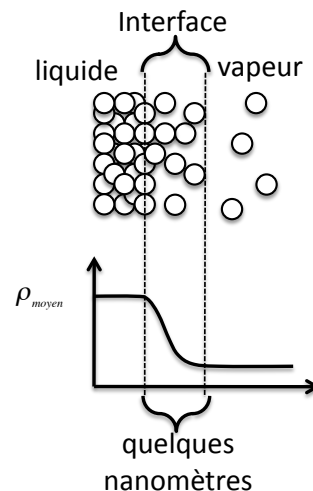
D'un point de vue macroscopique, un écoulement diphasique est très bien décrit par des variables (vitesse, pression, densité, température ...) qui varient de façon continue dans des volumes distincts. Les interfaces entre les volumes sont des surfaces de discontinuités de ces grandeurs.

La difficulté de ce problème est principalement due aux interactions qu'il y a entre les différentes phases au niveau des interfaces. Toutefois, précisons tout d'abord le concept d'interface.

1.2.1 Les interfaces ou discontinuités

Les problèmes à changement de phase sont généralement définis comme des écoulements à deux phases, principalement un liquide et sa vapeur. D'un point de vue macroscopique, la séparation entre les phases est clairement distincte et s'apparente à une surface ou une ligne. Les interfaces et les lignes de contact (ou lignes triples) constituent ces séparations.

A l'échelle moléculaire, une interface est une zone de transition pour les grandeurs physiques moyennes telle que la masse volumique. L'épaisseur de cette zone de transition est généralement de quelques nanomètres. Ainsi, les phénomènes interfaciaux ont pour origine la physique moléculaire intervenant au sein de cette zone de transition. Ceux-ci peuvent être décrits dans le détail à ces échelles, cependant ce qui nous intéresse, ce sont leurs effets induits aux échelles macroscopiques. Cela correspond à regarder les fluides en moyenne sur des échelles spatiales et temporelles suffisamment grandes par rapport à l'épaisseur de cette zone de transition. Une telle vision nous force à concevoir l'interface comme une discontinuité à l'épaisseur infiniment fine.



De ce fait, nous sommes contraints de décrire les phénomènes interfaciaux par des grandeurs supplémentaires non incluses dans le comportement volumique des fluides. Ces grandeurs sont localisées sur les interfaces et sont : la tension superficielle, l'angle de contact et la mouillabilité, la ligne de contact et les singularités de transfert. Nous allons décrire plus en détails ces notions et tenter de dégager qu'elles peuvent être leurs répercussions macroscopiques sur le système. Des informations plus précises sur ces notions peuvent être consultées dans [Mathieu \(2003\)](#); [Serin \(2007\)](#).

Avant cela, nous allons dissocier ces discontinuités en deux catégories différentes :

- Les interfaces de dimension 2 correspondent à la frontière entre la phase liquide et la phase gazeuse. Ces interfaces sont des surfaces dont la forme est régie par les forces de tensions superficielles, les forces gravitaires et la dynamique de l'écoulement.
- Les interfaces de dimension 1 correspondent aux frontières des interfaces de dimension 2. Ce sont des lignes en contact avec la phase gazeuse, la phase liquide et la phase solide. La topologie (angle de contact et forme de la ligne triple) du raccord entre les phases est déterminée par les forces de tensions interfaciales des trois phases concernées ainsi que la dynamique et la thermique locales.

Les phénomènes interfaciaux relatifs aux discontinuités de dimension 2 introduisent les relations de fermeture ou les relations de sauts entre les phases volumiques du système d'étude. Ces relations permettent de tenir compte de ces effets dans une description macroscopique des écoulements diphasiques à partir des équations de conservation. Les phénomènes relatifs aux discontinuités de dimension 1 permettent également de se raccorder à la mécanique des milieux continus. En effet, au voisinage de ces discontinuités, des singularités apparaissent rendant impossible l'établissement naturel des équations de conservation. L'intégration de ces phénomènes moléculaires jusqu'à une échelle de coupure aboutit à une relation de fermeture que l'on peut raccorder aux équations macroscopiques.

1.2.2 La tension superficielle

D'un point de vue moléculaire, dans la zone de transition volumique, les forces intermoléculaires ne sont pas isotropes. A l'intérieur d'un liquide, la densité moléculaire est très forte. Dans le gaz, celle-ci est faible. A l'intérieur du liquide, chaque molécule du liquide subit l'attraction de ses voisines. La résultante de ces forces est donc nulle. Dans la zone interfaciale, ces forces d'attraction sont déséquilibrées car l'attraction moléculaire exercée du côté gazeux est beaucoup plus faible. Par conséquent, la résultante des forces d'attraction n'est pas nulle et est dirigée vers l'intérieur du liquide.

D'un point de vue macroscopique, ceci se traduit par une tension dans la direction tangente à l'interface. Cette tension est la tension superficielle ou tension de surface (en $J.m^{-2}$ ou $N.m^{-1}$). Celle-ci a pour effet de minimiser la surface de l'interface entre les deux phases.

La tension superficielle dépend de la température car les forces de cohésion intermoléculaires diminuent avec celle-ci. Pour de nombreux fluides purs sous forme liquide, cette dépendance

est linéaire. Au point critique, température pour laquelle la phase liquide ne peut exister, la tension superficielle s'annule. C'est pourquoi, celle-ci s'exprime par l'équation suivante :

$$\sigma = \sigma_0 \left(1 - \frac{T}{T_{crit}} \right) \text{ unités : } N.m^{-1} \quad (1.1)$$

Le concept de tension de surface est général et s'applique aussi bien aux interfaces liquide-gaz qu'aux interfaces liquide-solide et solide-gaz.

L'équilibre de l'interface implique que la résultante des forces exercées par la tension superficielle avec celle dérivée des contraintes normales à l'interface (pression, viscosité) est nulle. Cela amène, dans le cas statique ou de l'écoulement de fluides parfait, à l'équation de Laplace-Young, définie par l'expression suivante :

$$\underbrace{(p_{gaz} - p_{liquide}) R_1 R_2}_{\text{résultante des forces de pression}} = \underbrace{\sigma (R_1 + R_2)}_{\text{résultante des forces de tension superficielle}} \quad (1.2)$$

Dans cette expression R_1 et R_2 sont les rayons de courbure dans les deux directions orthogonales à l'interface. **Cette expression illustre le lien existant entre la courbure de l'interface et les forces de tension superficielle.**

Les forces de tension de surface prennent effet au niveau des discontinuités de dimension 2 afin de rendre compte des phénomènes moléculaires intervenant au sein de l'épaisseur de l'interface.

La longueur capillaire définie par l'expression 1.3, donne l'ordre de grandeur des échelles en dessous desquelles les phénomènes de tension superficielle sont importants devant les forces de gravité. Autour de ces échelles, la forme de l'interface est déterminée par une compétition entre ces deux effets.

$$L_{cap} = \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_{liq} - \rho_{gaz})}} \quad (1.3)$$

En présence d'une paroi, les interactions moléculaires relatives au solide viennent s'ajouter. Pour caractériser ces interactions d'un point de vue macroscopique, on définit une grandeur nommée *mouillabilité* du fluide.

1.2.3 Mouillabilité d'un fluide et angle de contact macroscopique

Le paramètre de mouillabilité, ou coefficient d'étalement est défini par l'expression suivante :

$$S \triangleq \sigma_s - \sigma_{sl} - \sigma_l \quad (1.4)$$

Où σ_s , σ_{sl} , σ_l sont les tensions de surface solide-vapeur, solide-liquide, liquide-vapeur.

Ce paramètre correspond à l'énergie qu'il faut fournir pour réaliser une transformation correspondant à un étalement. Si $S > 0$, l'étalement est illimité. C'est le cas de l'hélium sur de nombreuses parois. Si $S < 0$, l'étalement s'arrête et l'interface possède une frontière. Cette frontière est la ligne de contact ou ligne triple. Cette ligne est l'intersection entre la phase liquide, la phase gazeuse et la phase solide. Au niveau de cette ligne de contact, les interactions moléculaires sont de trois types : solide-liquide σ_{sl} , liquide-gaz σ_l , solide-gaz σ_s . L'angle de contact est l'angle θ formé par la tangente à l'interface au niveau de cette ligne et le solide (figure 1.2.3). **Cet angle est introduit pour retranscrire à l'échelle macroscopique les interactions moléculaires relatives à cette discontinuité de dimension 1.**

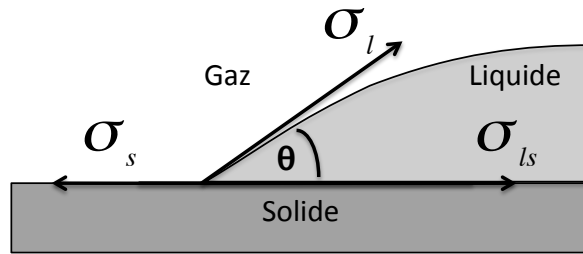


FIGURE 1.4 – Angle de contact statique

Lorsqu'il n'y a pas de changement de phase et que la ligne de contact n'est pas en mouvement, cet angle, imposant la géométrie de l'interface en son bord, est défini par l'équilibre des tensions interfaciales, selon l'équation de Young-Dupré :

$$\sigma_{sl} + \sigma_l \cos \theta - \sigma_s = 0 \quad (1.5)$$

Donc :

$$\cos \theta = \frac{\sigma_s - \sigma_{sl}}{\sigma_l} \quad (1.6)$$

En fonction de la valeur de l'angle de contact des fluides, on peut établir une classification grossière de la mouillabilité des fluides :

- non mouillant si l'angle de contact est supérieur à 90°
- mouillant si l'angle de contact est inférieur à 90°
- parfaitement mouillant si l'angle de contact est égal à 0° (cas de l'hélium)

Ces notions décrivent le phénomène de capillarité d'un point de vue macroscopique et dans le cas statique sans changement de phase. D'un point de vue microscopique, il existe un film liquide mince dont la présence joue un rôle important sur les transferts thermiques. En cas de changement de phase, ces films liquides dépendent et influent sur l'angle de contact.

1.2.4 Ligne triple et singularités

1.2.4.1 Singularité dynamique

En présence de ligne triple dynamique et de changement de phase, des auteurs présentent des modèles couplant les différents phénomènes physiques [Mathieu \(2003\)](#), [Stephan and Hammer \(1994\)](#), [Rednikov et al. \(2009\)](#), [Colinet et al. \(2007\)](#). Ces modèles, relativement complexes, utilisent des paramètres que seule l'expérience peut calibrer et dépendent de la vitesse de la ligne de contact.

De façon simplifiée, le fait de considérer une vitesse de la ligne de contact dans les équations de Stokes aboutit à une singularité des contraintes visqueuses. Ceci engendre une divergence de la pression et par conséquent, d'après l'équation de Laplace-Young, une divergence de la courbure au niveau de la ligne de contact. C'est pourquoi ces modèles nécessitent l'introduction d'ingrédients physiques supplémentaires relatifs à des échelles inférieures. L'angle de contact dynamique résultant est souvent exprimé en fonction du nombre de capillarité Ca , qui est défini à partir de la vitesse de déplacement de ligne de contact V_{LT} , de la tension de surface σ_l et de la viscosité dynamique μ_L . Son expression est :

$$Ca = \frac{\mu_L V_{LT}}{\sigma_l} \quad (1.7)$$

1.2.4.2 Singularité thermique

Au voisinage de la ligne triple, les échanges de chaleur peuvent être importants, la description macroscopique est également insuffisante pour prédire ces échanges. La figure 1.5 schématise la vision macroscopique (gauche) et la vision microscopique de la ligne de contact entre les trois phases liquide-solide-gaz.

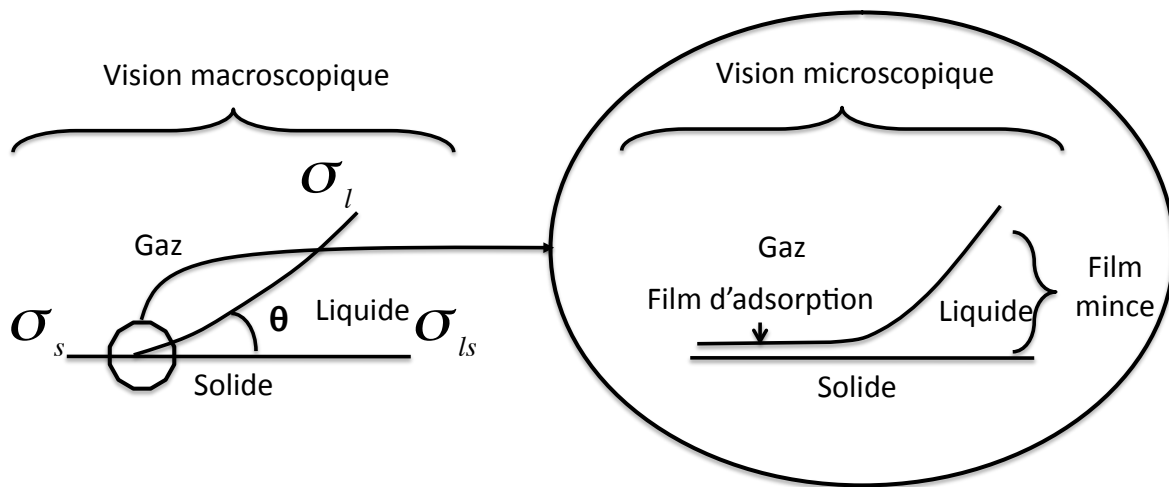


FIGURE 1.5 – Vision macro et microscopique de la ligne triple

D'un point de vue microscopique, la notion de film mince et de film de liquide adsorbé a été introduite par [Renk and Wayner Jr \(1979b\)](#). Ceci est dû aux forces intermoléculaires existantes à ces échelles. Dans cette situation, la loi de Laplace-Young ne suffit plus à modéliser l'interface. C'est pourquoi les modèles de ligne triple introduisent une échelle de coupure en-dessous de laquelle ces interactions sont prises en compte et sont intégrées pour se raccorder avec l'échelle macroscopique. Ainsi, l'interface au voisinage de la ligne triple est divisée en trois régions :

- Le ménisque à l'échelle macroscopique dans lequel les forces capillaires dominent.
- le film mince gouverné à la fois par les forces capillaires, visqueuses et les forces intermoléculaires de courtes portées.
- le film adsorbé ou seules les forces intermoléculaires de courtes portées, connues sous le nom de pression de disjonction, sont dominantes.

Les deux premières régions sont le siège de la vaporisation du liquide, ce qui provoque un écoulement de fluide dans ces régions. Dans la première région, l'écoulement est gouverné par les forces capillaires. Dans la seconde région, l'écoulement est piloté par les variations des forces intermoléculaires de courtes portées. Le flux de chaleur dans cette région peut être très important, cependant cette zone, communément appelée *micro-région* ne s'étend que sur une longueur de l'ordre du μm . Par conséquent son influence sur le processus d'évaporation dépend de la géométrie de la configuration étudiée.

En dehors de la micro-région, un autre moteur de l'écoulement est l'effet Marangoni.

1.2.5 Les effets Marangoni

L'équation [1.1](#) illustre la dépendance de la tension de surface avec la température.

Le fort taux d'évaporation local au niveau de la micro-région peut générer un gradient tangentiel le long de l'interface provoquant ainsi une variation de tension superficielle le long de l'interface, c'est-à-dire une contrainte tangentielle interfaciale qui tendra à accélérer les particules fluides voisines de l'interface. Ceci génère en général un écoulement de liquide de la zone chaude vers la zone froide.

Un autre gradient de tension superficielle peut être provoqué par un gradient de concentration de gaz incondensable le long de l'interface. En effet, la concentration de gaz incondensable à l'interface est plus faible dans les zones à fort taux d'évaporation.

Ce phénomène est appelé Marangoni solutal.

L'effet Marangoni peut être une des causes de la formation de structures convectives observées sur la figure [1.3](#).

La convection gravitaire peut également être un des effets générateurs de ces structures.

1.2.6 Effet gravitaire

La vaporisation du fluide au niveau de l'interface provoque un abaissement de la température de celle-ci. Le gradient thermique vertical ainsi créé dans le liquide génère une situation métastable dans le film liquide. Si l'interface n'est pas plane, un gradient horizontal de température apparaît dans le liquide qui crée une situation inconditionnellement instable. Cet effet peut générer des structures de convection gravitaire.

Tous les mécanismes qualitativement décrits précédemment ont pour origine les interactions entre les phases au niveau de leur frontière. Une description précise de ces frontières, aussi bien d'un point de vue numérique qu'expérimental, s'avère être capitale pour la compréhension et la modélisation de ce problème.

1.3 Modélisation du problème

Les phénomènes interfaciaux décrits précédemment apparaissent dans les équations de conservation au niveau des interfaces sous forme de relations de saut qui permettent d'obtenir des bilans. Ces relations de sauts gouvernent principalement la physique du problème et leur dépendance à la géométrie de l'interface est très forte. De ce fait, la modélisation numérique, développée en parallèle, se base sur une méthode particulière de description des interfaces : à chaque pas de temps, les interfaces (fluide-solide et liquide-gaz) sont des lignes de maillages. Le maillage s'adapte à chaque pas de temps à la déformation des interfaces mobiles, autorisant le passage de noeuds à travers l'interface concernée. Ainsi, la description géométrique de l'interface est très précise et les conditions aux limites interfaciales de contraintes mécaniques, de vitesse ou de flux de chaleur, peuvent être appliquées sans perte de précision. Cette méthode a pour but de retranscrire très précisément la physique des interfaces et d'appliquer des modèles de lignes de contact.

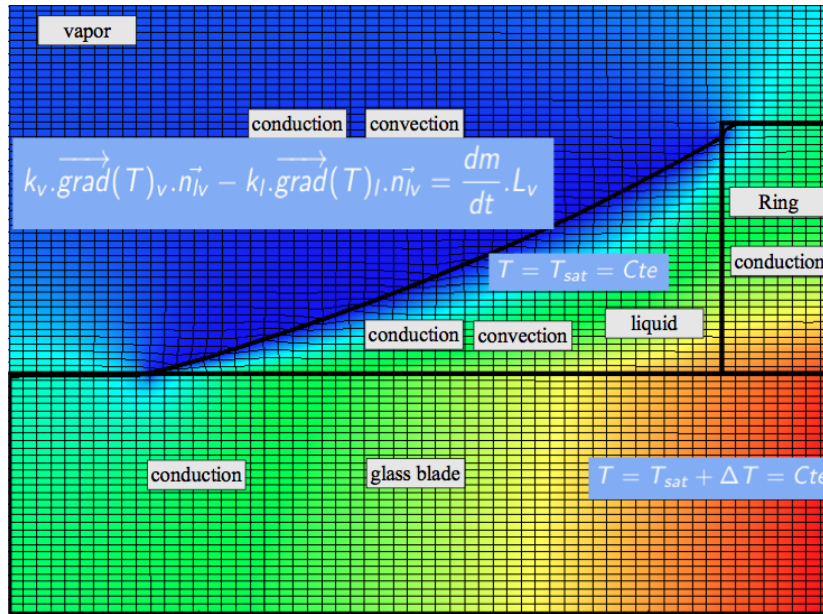


FIGURE 1.6 – Maillage mobile adapté sur l'interface [Guignard et al. \(2010\)](#)

Les nombreux phénomènes intervenant dans ce problème engendrent un écoulement tridimensionnel. C'est ce qui a motivé la réalisation d'une des tâches principales de cette étude : l'extension à trois dimensions de la méthode de suivi d'interface infiniment fine bidimensionnelle précédemment citée. Cette extension est présentée à partir du chapitre 4.3.

1.4 Quelques ordres de grandeurs relatifs aux trois étapes du processus d'évaporation du problème étudié

Nous présentons quelques ordres de grandeurs relatifs aux trois étapes principales, décrites dans la partie 1.1.1 du processus d'évaporation. Ces résultats ont été obtenus à partir des outils développés dans les chapitres suivants.

Pour cette description, le fluide utilisé est du HFE_{7100} , le substrat est du verre de 1 mm d'épaisseur et la quantité initiale de fluide est de 25 μl initialement à une température de 23 $^{\circ}C$. L'atmosphère n'étant pas confinée, la totalité du fluide sera évaporée. Par conséquent, une quantité de 4,5 joules est mise en jeu pour cette évaporation dont la durée est de 140 secondes. Cela implique une puissance moyenne échangée de 32 mW correspondant à une densité de 1,1 $kW.m^{-2}$ ($\frac{\text{Puissance}}{\text{Surface du puits}}$).

Le puits d'évaporation (paille) a une masse de 10^{-3} g. Par conséquent l'aspect capacitif du puits défini comme étant le produit de la masse par la chaleur spécifique est de 10^{-3} $J.K^{-1}$. Cette valeur étant très largement inférieure à la quantité d'énergie totale mise en jeu, les effets de la ligne triple située sur la paroi du puits sont négligés.

1.4.1 Etape 1 : avant l'apparition de la ligne triple

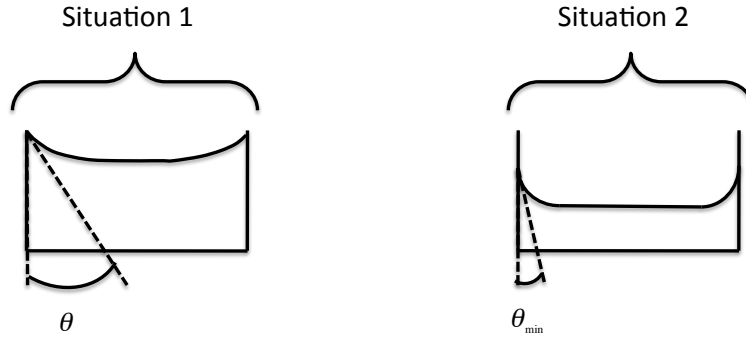
Le puits d'évaporation est rempli de la quantité initiale de liquide à évaporer. En fonction de la hauteur du puits ou de la quantité initiale, deux types de comportements peuvent être observés.

- La ligne triple au niveau de la paroi du puits d'évaporation reste accrochée à l'extrémité supérieure du puits d'évaporation et l'interface se creuse au cours du processus d'évaporation en son centre jusqu'à une valeur critique d'angle de contact au niveau de la paroi du puits.
- La ligne triple descend le long de la paroi du puits d'évaporation et la courbure de l'interface n'évolue que peu au cours du processus d'évaporation.

On sera dans la première situation tant que la distance entre la position inférieure de l'interface et la position supérieure du puits d'évaporation sera inférieure à la longueur capillaire. Dans ce cas, l'interface se creuse, augmentant cette distance. Une fois que cette distance est égale à la longueur capillaire, la courbure maximale étant atteinte, la ligne triple située au niveau de la paroi descend.

La longueur capillaire est, dans le cas étudié, de 0,9 mm. Pour un volume initial de liquide de 25 μL , on montre plus loin, 2.5.2, que la concavité de l'interface ne varie que très peu. Par conséquent il semblerait que l'on soit dans la situation 2 pour un tel volume initial.

La vitesse de descente moyenne de l'interface est de l'ordre de 8 $\mu m.s^{-1}$, elle est quasiment constante jusqu'à ce que l'épaisseur de film au centre de l'interface devienne très faible donnant ainsi naissance à la zone sèche.



1.4.2 Etape 2 : rupture du film, naissance de la zone sèche

Au bout d'environ 40 s, l'épaisseur de film au centre du puits devient suffisamment fine pour que des franges d'interférence puissent apparaître. Des techniques d'interférométrie deviennent nécessaires afin de mesurer précisément et localement les hauteurs de film liquide. Au moment de la rupture, l'énergie de tension superficielle est brusquement libérée et convertie en énergie cinétique au niveau de la ligne triple délimitant la tâche sèche qui vient d'être créée.

Au bout d'une seconde après l'apparition de celle-ci, son rayon mesure 0,25 mm. Initialement de l'ordre de $100 \mu\text{m.s}^{-1}$, la vitesse de la ligne triple décroît de façon exponentielle pour se stabiliser à $25 \mu\text{m.s}^{-1}$ au bout de 15 s. Au moment de l'apparition de la ligne triple, le volume de fluide restant à évaporer est de $15 \mu\text{L}$.

1.4.3 Etape 3 : démouillage évaporatif

La tâche sèche étant créée, celle-ci a une forme circulaire dont le diamètre croît de façon excentrique à la vitesse de $25 \mu\text{m.s}^{-1}$. L'angle de contact macroscopique au voisinage de la ligne de contact, déterminé grâce à la méthode décrite dans le chapitre 2, est de 5° jusqu'à la fin du processus d'évaporation. Les structures convectives semblent être absentes au voisinage de la ligne triple, puis apparaissent à partir d'une certaine épaisseur de fluide.

On mesure un flux d'évaporation linéique propre à la micro-région située au voisinage de la ligne triple de $5 \text{ mg.s}^{-1}.\text{m}^{-1}$ équivalent à une densité de flux linéique de $0,6 \text{ W.m}^{-1}$.

1.5 Conclusion

Une expérience reproduisant l'évaporation d'un film axisymétrique avec apparition de ligne triple a été mise en place dans le but d'étudier et de modéliser les problèmes de changement de phase avec ligne de contact. Cette expérience, constituée de trois étapes principales permet l'étude de l'évaporation d'un film liquide, l'étude de la rupture d'un film liquide et le démouillage évaporatif d'un film liquide en présence de ligne de contact. Ces trois étapes

impliquent trois degrés de complexité :

- Etape 1 : L'évaporation d'un film liquide à surface d'interface quasi constante donne accès à la mesure de la densité de flux d'évaporation, donnée très intéressante pour les simulations numériques.
- Etape 2 : La rupture d'un film est un sujet d'étude actuel. L'expérience permet l'étude de la dynamique de la rupture, de la forme de la tâche sèche et des effets thermiques sur la rupture.
- Etape 3 : Le démouillage évaporatif permet la mesure de la vitesse de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la courbure au voisinage de l'interface, données également très utiles à la modélisation numérique. De plus, cette étape favorise la mise en évidence des effets de ligne triple car au cours du processus d'évaporation, la surface de l'interface diminue alors que le périmètre de ligne triple augmente. L'utilisation de la densité de flux obtenue à l'étape 1 permet une première quantification des flux propres aux effets de ligne de contact.

La présentation des ingrédients physiques gouvernant les différentes discontinuités nous ont fait comprendre le caractère multi-échelles de ce problème. En effet, la compréhension des phénomènes d'interface nécessite le recours aux échelles moléculaires empêchant toutes simulations macroscopiques directes. L'intégration de cette physique aux échelles macroscopiques se traduit par des modèles ou des effets dont la dépendance à la géométrie des discontinuités est très forte. C'est pourquoi, tant d'un point de vue numérique qu'expérimental, la précision sur la description géométrique des interfaces nous apparaît être un des points clefs de la compréhension à ce problème.

Une problématique relative à ce problème axisymétrique de film en évaporation tient dans le fait que l'interface prend une forme concave interdisant toute visualisation de son profil par le côté. Pour cette raison, une méthode optique de suivi d'interface expérimentale a été développée.

Outils de mesure de conditions limites expérimentales

Chapitre 2

Méthode optique de suivi d'interface

Sommaire

2.1	Contexte scientifique	33
2.1.1	Etat de l'art sur les différentes techniques de mesure de forme d'interface	33
2.1.2	Synthèse bibliographique	35
2.2	Description de la méthode	35
2.2.1	Dispositif expérimental	35
2.2.2	Visualisation sur l'écran et interprétation	37
2.2.3	Méthode de reconstruction de l'interface	38
2.3	Validation de la méthode de reconstruction de l'interface	45
2.3.1	Etalonnage du dispositif d'acquisition numérique	46
2.3.2	Validation numérique : logiciel de lancer de rayons	51
2.3.3	Validation des hypothèses de l'algorithme d'inversion optique	54
2.3.4	Validation sur film à géométrie connue	55
2.3.5	Expérience de la pesée : Validation dynamique de la méthode	59
2.3.6	Retour sur l'étalonnage : Génération d'images à grande gamme dynamique	62
2.3.7	Limites de la méthode	64
2.4	Résultats obtenus à l'aide de la méthode	66
2.5	Applications	69
2.5.1	Calcul de l'épaisseur de film avant l'apparition de la ligne triple	69
2.5.2	Forme de l'interface avant l'apparition de la ligne triple	70
2.6	Conclusion	71

Après avoir passé en revue les phénomènes physiques importants associés au problème présenté dans le chapitre précédent, nous comprenons l'importance de connaître la géométrie de l'interface.

D'un point de vue expérimental, beaucoup de méthodes ont été développées à ce sujet. Toutefois, étant donné la configuration géométrique particulière de notre problème, il nous a semblé judicieux de développer notre propre méthode. Particulièrement bien adaptée au problème étudié, celle-ci nous permet de mesurer la vitesse de la ligne de contact, l'angle de contact dynamique, ainsi que la forme et la courbure de l'interface liquide-gaz.

Ce chapitre présente le fonctionnement détaillé de la technique mise au point ainsi que les différents tests de validation effectués et ses limites.

2.1 Contexte scientifique

Un des buts de l'expérience du problème axisymétrique de film en évaporation est dans un premier temps d'obtenir les informations géométriques relatives à l'interface en particulier au voisinage de la ligne triple. Plus concrètement, de mesurer la position dynamique de la ligne triple afin de déterminer sa vitesse, de mesurer l'angle de contact du ménisque au niveau de la ligne triple ainsi que la forme de l'interface gaz liquide.

Le problème de cette expérience vient du ménisque, qui a une forme concave et est contenu dans un puits cylindrique, ce qui nous empêche d'avoir une visualisation de celui-ci par le coté à l'aide d'une caméra CCD comme cela est habituellement fait dans le cadre de l'étude des gouttes.

Ainsi le but de la méthode présentée dans ce chapitre, est de calculer dynamiquement la forme de l'interface du ménisque de façon non intrusive afin d'obtenir les propriétés géométriques désirées. Pour ce faire, une technique de sondage laser exploitant les variations d'intensités lumineuses d'une nappe laser traversant l'interface liquide-vapeur induite par la courbure de celle-ci à été développée.

2.1.1 Etat de l'art sur les différentes techniques de mesure de forme d'interface

Il existe de nombreuses techniques permettant de mesurer la forme dynamique d'une interface gaz-liquide d'une goutte ou d'un film sur une surface plate. Récemment, un résumé des différentes techniques existantes pour les gouttes a été publié [Chau \(2009\)](#). Les techniques de mesure du profil d'une goutte sur surface plate y sont classées en différentes catégories.

La "drop profile" technique consiste en une mesure directe de l'angle de contact de part la vue du profil de la goutte. Premièrement utilisée à l'aide d'un télescope goniomètre [Bigelow et al. \(1946\)](#), cette technique a été considérablement améliorée depuis l'apparition des caméras CCD. Dans [Hunter \(2001\)](#), il est montré que pour des angles de contact supérieurs à 20 degrés, la précision de cette technique est de 2 degrés. Une des limitations de cette technique est que le dispositif d'acquisition permet de voir seulement la surface projetée du profil de la goutte et donne accès uniquement à l'angle de contact au niveau du plan médian le plus large de la section.

Une autre méthode, dite "drop dimensions method", mesure les rayons de courbure de la goutte grâce à une photographie de celle-ci. Ensuite, en corrélant ces mesures à l'équation de Laplace, où R_1 et R_2 sont les principaux rayons de courbure, γ la tension de surface et ΔP la différence de pression le long de l'interface :

$$\Delta P = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.1)$$

on calcule le profil entier de la goutte dans le cadre d'une goutte axisymétrique. Dans le papier [Fisher \(1979\)](#), les auteurs présentent une relation entre l'angle de contact, le rayon et le volume d'une goutte dans le but de mesurer des petits angles de contact. Cette méthode

voit ses limites lorsque le profil de la goutte est fortement influencé par la gravité. Ces techniques ont été améliorées par la méthode (ADSA-P) "Axisymmetric Drop Shape Analysis Profile". Développée dans un premier temps par [Rotenberg et al. \(1983\)](#) puis améliorée par [Spelt et al. \(1987\)](#) et [Cheng et al. \(1990\)](#), cette technique recherche le profil théorique de la goutte à partir de l'équation de Laplace qui correspond le mieux au profil réel extrait d'une image de côté de la goutte en utilisant la tension de surface comme variable d'ajustement. Du profil calculé, on peut déduire la tension de surface, l'angle de contact, le volume et la surface de la goutte. Dans [Del Rio et al. \(1998\)](#), les auteurs rapportent que la méthode ADSA-P est fiable et peu sensible aux hétérogénéités et à la rugosité. Cette méthode apparaît donc appropriée aux surfaces minérales. La méthode ADSA-D "Axisymmetric Drop Shape Analysis Diameter", [Skinner et al. \(1989\)](#) et [Moy et al. \(1991\)](#), est similaire, à part l'information expérimentale qui est une vue de dessus de la goutte. Cette méthode est préférable à la précédente pour les surfaces rugueuses. [Rodriguez-Valverde et al. \(2002\)](#) montrent que ces méthodes ADSA sont précises, automatiques et reproductibles. En résumé, ce genre de technique donne de bons résultats pour des angles supérieurs à 20 degrés mais une vue de côté ou de dessus est nécessaire, ce qui n'est pas évident dans le cadre de l'étude des films minces.

D'autres résultats sur la mesure des angles de contact, très précis, sont obtenus par interférométrie. On peut citer les travaux de [Wayner et al. \(2002\)](#) et [Panchamgam et al. \(2008\)](#). Cependant, ce genre de méthode ne marche que pour les petits angles de contact, inférieurs à 2°. Les techniques Schlieren sont également très précises [Scheid et al. \(2000\)](#) mais souffrent du même genre de problème.

D'autres méthodes optiques ont été inventées. Une méthode optique indirecte consistant à observer une grille projetée qui se déforme avec la courbure de l'interface gaz-liquide a été développée [Hegseth et al. \(2005\)](#). Cette technique calcule le profil de l'interface du film et l'angle de contact apparent. D'autres méthodes indirectes ont été développées utilisant les phénomènes de réflexion et réfraction d'un faisceau laser. Une méthode qui consiste en l'illumination d'une goutte avec une incidence normale au solide par un large rayon laser a été proposée [Allain et al. \(1985\)](#). Le rayon est réfléchi par la goutte en un cône de lumière dont l'angle est une fonction de l'angle de contact moyen autour du périmètre de la goutte. Depuis, plusieurs méthodes utilisant des lasers existent et permettent de calculer la forme de l'interface et l'angle de contact. Des techniques utilisant l'absorption de la lumière ont été utilisées [Goodwin III \(1991\)](#). Un système permettant de calculer la hauteur d'un film en mesurant la fluorescence de celui-ci dans le cas d'une surface libre a été présenté [Johnson et al. \(1997\)](#). Dans une autre méthode, [Buguin et al. \(1999\)](#), appliquée à l'assèchement d'un film axisymétrique, un rayon laser est réfracté par l'interface et sa déviation est suivie au cours du temps. Une technique similaire utilisant une nappe laser a été développée [Rio et al. \(2004\)](#). Cette méthode exploite la déflexion de la nappe après réfraction en traversant l'interface liquide gaz et calcule ainsi l'angle de contact au niveau de la ligne triple de la partie sèche.

2.1.2 Synthèse bibliographique

De nombreuses méthodes ont été mises au point pour l'étude des gouttes en évaporation, cependant notre configuration d'étude nous empêche d'avoir une vue de côté de l'interface. De plus, les fluides utilisés sont généralement très mouillants et peu de méthodes sont suffisamment précises sur la mesure des angles de contact lorsque ceux-ci sont inférieurs à 20° . Les méthodes interférométriques par franges sont limitées aux angles très faibles (inférieurs à 2°). Les méthodes basées sur l'optique géométrique (réflexion ou déflexion d'un faisceau lumineux), ne mesurent, à notre connaissance, que l'angle de contact et pas la hauteur de film au voisinage de la ligne triple.

La méthode présentée ici est également basée sur la réfraction lumineuse au travers d'une interface liquide-gaz. Nous montrons la capacité de notre méthode à calculer instantanément l'angle de contact et la forme de l'interface d'un film axisymétrique en évaporation. Cette méthode peut également s'appliquer à des gouttes dont l'angle de contact est faible (inférieur à 40°).

Cette méthode s'avère être très sensible, ce qui présente un avantage important dans le cadre de l'étude de petits angles de contact ou pour les fluides très mouillants. De plus l'information mesurée est une dilatation géométrique non linéaire d'une fonction de la courbure de l'interface. Cela implique qu'après reconstruction de l'interface, la courbure associée provient de la courbure réelle et non de l'interpolation de l'interface. Par conséquent, l'information recueillie sur la courbure est une donnée très pertinente pour la simulation numérique.

2.2 Description de la méthode

Cette technique analyse les variations d'intensité lumineuses des nappes lasers dues à leurs réfractions en traversant les interfaces consécutives (solide-liquide-gaz). L'intensité lumineuse de l'image des nappes lasers sur un écran perpendiculaire est inversée. Le résultat de cette inversion est la forme de l'interface et la position de la ligne triple au cours du processus d'évaporation.

2.2.1 Dispositif expérimental

Un puits (*paille*) de 6 mm de diamètre et de 1,5 mm de profondeur est déposé sur une lame de microscope de 1mm d'épaisseur. Le puits est précisément rempli avec un fluide à faible température d'évaporation (HFE_{7100} ou FC72). Une diode laser ($\lambda = 635$ nm) génère des nappes laser triangulaires avec un angle d'ouverture d'environ 30 degrés. Ces nappes laser illuminent la lame de microscope par dessous et après réfraction au travers de l'interface, elles impactent un écran situé environ 15 cm au dessus de la lame de microscope. Un appareil photo à capteur CMOS (Nikon D300) de haute résolution (2848x4288) est utilisé pour l'acquisition de l'image. Le protocole expérimental est illustré par la figure [2.1](#)

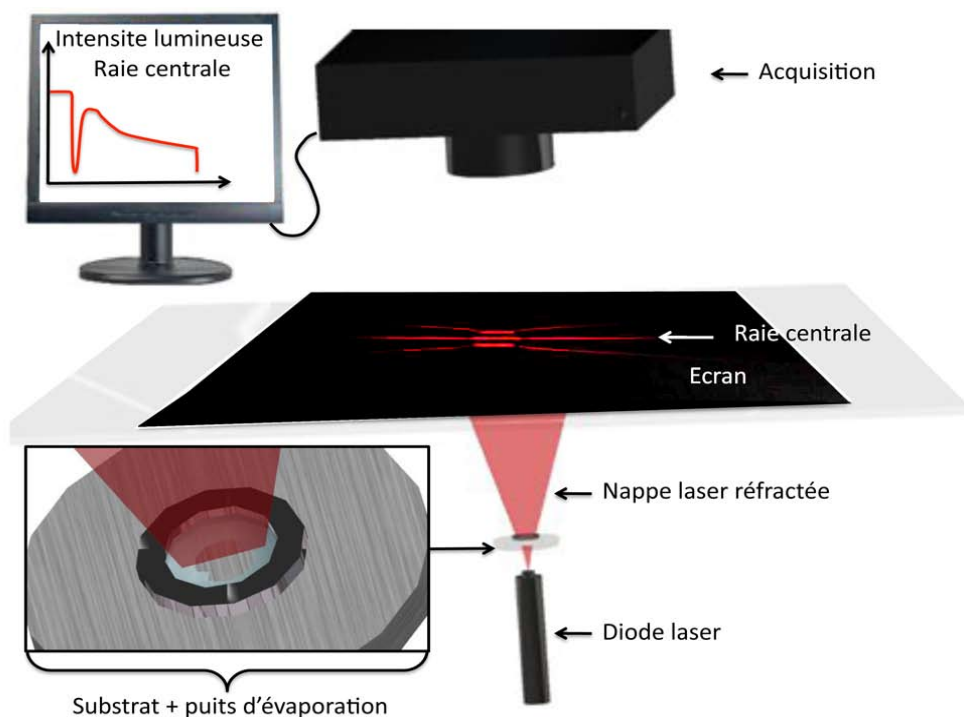
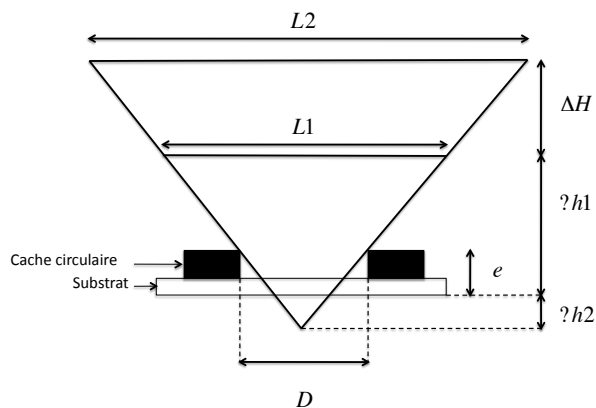


FIGURE 2.1 – Dispositif expérimental

Les distances entre les différents éléments du protocole expérimental telles que la distance entre l'écran et le substrat $h1$ sur le schéma à droite ou la distance entre le substrat et la source laser $h2$, sont connues à une précision micrométrique. Pour ce faire, la largeur des raies laser impactant l'écran est mesurée pour deux hauteurs d'écran différentes. La distance entre ces deux hauteurs ΔH est connue à l'aide d'un banc micrométrique. Le diamètre D du cache circulaire est mesuré à l'aide d'un objectif macroscopique permettant d'obtenir une résolution de $4 \mu m$. Par des considérations géométriques, on calcule $h1$, $h2$ et l'angle de la nappe laser.



2.2.2 Visualisation sur l'écran et interprétation

La figure 2.2 montre l'image sur l'écran de projection des raies laser produites par leur impact sur l'écran. Dans un premier temps, on observe une dilatation le long de l'abscisse "X" des raies et une courbure des raies latérales. Cela est dû à l'augmentation de la concavité de l'interface. Dans ce cas, le volume de liquide s'apparente à une lentille plan-concave. Quand la ligne triple apparaît, laissant une zone sèche au milieu du puits, les raies non déformées apparaissent au centre du puits. Elles sont l'empreinte de la zone sèche sur l'écran. En regardant en détail l'écran, la limite entre la zone déformée et non déformée est une ombre circulaire ("C" sur la figure 2.2). Ce cercle est l'empreinte de la discontinuité : l'image de la ligne triple sur l'écran. Une fois que tout le liquide s'est évaporé, on obtient des raies non déformées au niveau de l'écran. L'intensité lumineuse est ensuite évaluée à l'aide de l'analyse numérique des images enregistrées en niveau de gris. Pour ce faire, on somme les valeurs de niveau de gris de la matrice CCD sur la largeur de la raie centrale afin d'évaluer les variations lumineuses du signal. Cela permet de quantifier l'intensité lumineuse et ainsi de calculer la vitesse de la ligne triple, l'angle de contact et la forme de l'interface ou l'épaisseur de film. La longueur "AB" (figure 2.2) correspond à la largeur de la zone d'ombre sur la raie laser centrale.

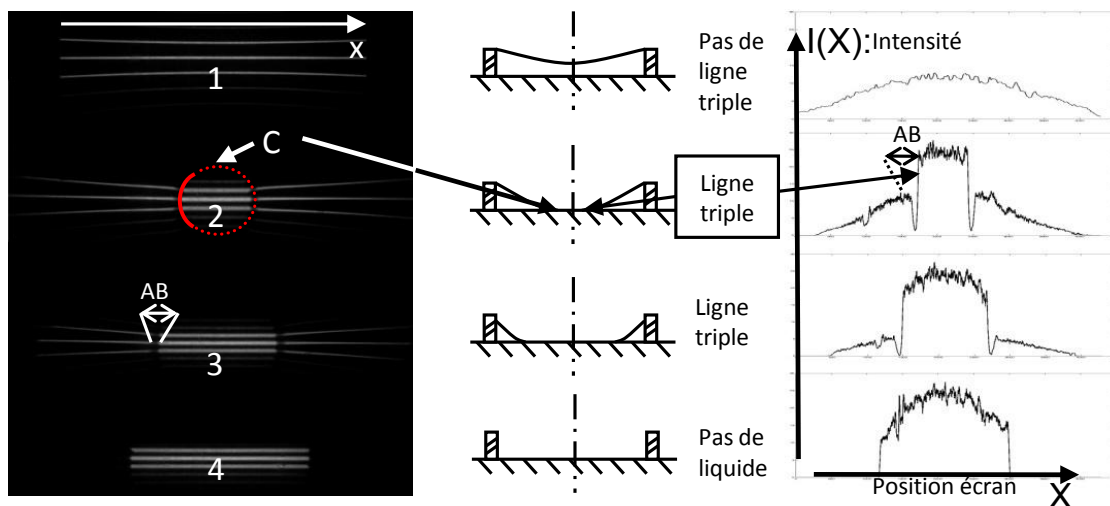


FIGURE 2.2 – Différentes configurations des nappes laser sur l'écran et profil d'intensité

Comme nous pouvons le voir sur la figure 2.2, la position de la ligne triple et la longueur "AB" peuvent être détectées sur le signal. Après quelques transformations géométriques (équations 2.2), on peut calculer la position réelle de la ligne triple au sein du puits et la valeur de l'angle de contact (équation 2.9). Pour calculer la forme de l'interface, une interpolation polynomiale du signal est faite puis inversée par la méthode présentée dans la section 2.2.3.

2.2.3 Méthode de reconstruction de l'interface

Le principe de cette méthode, pour la reconstruction de l'interface, est basé sur une inversion direct du profil d'intensité de la raie centrale que l'on peut observer sur la figure 2.2. Le point clef est de comprendre comment l'intensité est corrélée aux caractéristiques géométriques de l'interface.

La première étape (décrite dans la section 2.2.3.2), pour évaluer cette corrélation, est d'obtenir une fonction du signal. Pour ce faire, une interpolation polynomiale de la sommation des valeurs du signal (signal représenté sur figure 2.2) sur toute la longueur de la raie centrale de la matrice CCD est faite.

Dans une seconde étape (section 2.2.3.3) une première intégration numérique est faite en considérant une loi de conservation de l'énergie lumineuse et une description géométrique figure 2.6. Cela mène à la valeur de l'angle de chaque rayon que constitue la raie laser avec la verticale le long de la raie laser au niveau de l'abscisse "X" de l'écran (calcul de θ_{screen} sur figure 2.6).

Dans une troisième étape (section 2.2.3.4), on utilise la loi de Snell Descartes ainsi que les lois de la géométrie classique sur cet angle (θ_{screen}) afin de calculer la tangente à l'interface le long du diamètre du puits. Après le calcul de cette tangente, une seconde intégration numérique est faite pour obtenir l'épaisseur de film et la forme de l'interface.

On négligera dans toutes les équations la dépendance en température de l'indice de réfraction, on prouvera dans la partie 2.3.3 que cette dépendance n'influe pas.

Comme on peut le voir sur la figure 2.2, l'intensité décroît brutalement. Ceci est dû à la présence de la ligne triple. L'angle de contact est considéré comme non nul et donc une discontinuité de la normale du dioptre (verre-vapeur et liquide-vapeur) apparaît au niveau de la ligne triple ce qui provoque une forte divergence des rayons lumineux de part et d'autre de la ligne triple (figure 2.5). Cette divergence engendre le cercle sombre sur l'écran ("C" sur la figure 2.2). Dans ce cas, la partie du signal "AB" n'est pas prise en compte pour la reconstruction du profil de l'interface mais la distance AB est utilisée pour le calcul de l'angle de contact et des constantes d'intégration.

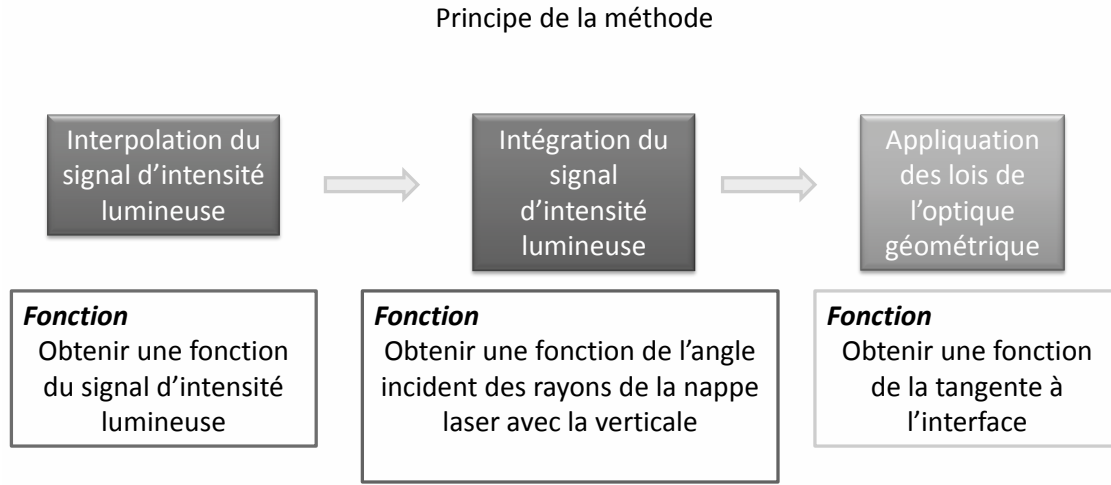


FIGURE 2.3 – Schéma de principe de la méthode optique pour la reconstruction de l'interface liquide-gaz

2.2.3.1 Calcul de la position de la ligne triple

A partir de l'image du profil d'intensité lumineuse, on peut détecter la position sur l'écran où l'intensité lumineuse chute brutalement, correspondant au point A sur l'image 2.5. Or comme cela a été évoqué précédemment, cette chute brutale d'intensité lumineuse caractérise l'image de la ligne triple sur l'écran. Le point A de l'image 2.5 est un des points du cercle "C" de l'image 2.2. Connaissant la position sur l'écran de la ligne triple, une simple approche géométrique et optique, figure 2.4, nous permet de calculer la position réelle de la ligne triple le long du rayon du puits par l'expression suivante :

$$RLT = \frac{L(b + \frac{e}{n_{verre}})}{b + \frac{e}{n_{verre}} + c - e} \quad (2.2)$$

Les notations utilisées sont celles représentées sur la figure 2.4, l'indice de réfraction de la lame de verre sera noté n_{verre} . La démonstration de cette formule est en annexe 2.

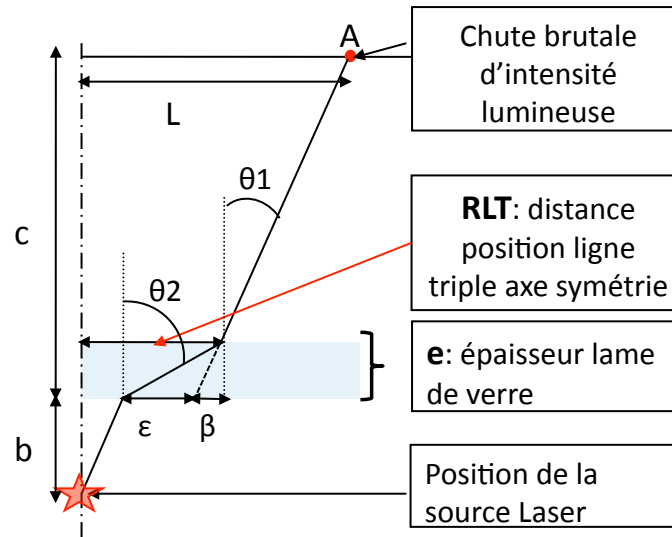


FIGURE 2.4 – Chemin lumineux du rayon le plus proche de la ligne triple

La variable RLT nous donne la position de la ligne triple pour une acquisition. On peut donc en déduire la vitesse à la fréquence d'acquisition près.

2.2.3.2 Interpolation du signal d'intensité lumineuse

Le problème étant axisymétrique, on se contente de l'étude de la moitié du signal représenté sur la figure 2.2. Cette étape consiste premièrement à détecter la position des points A et B sur la figure 2.5. Puis, une interpolation polynomiale commençant au point B est faite afin de décrire l'évolution du signal d'intensité lumineuse.

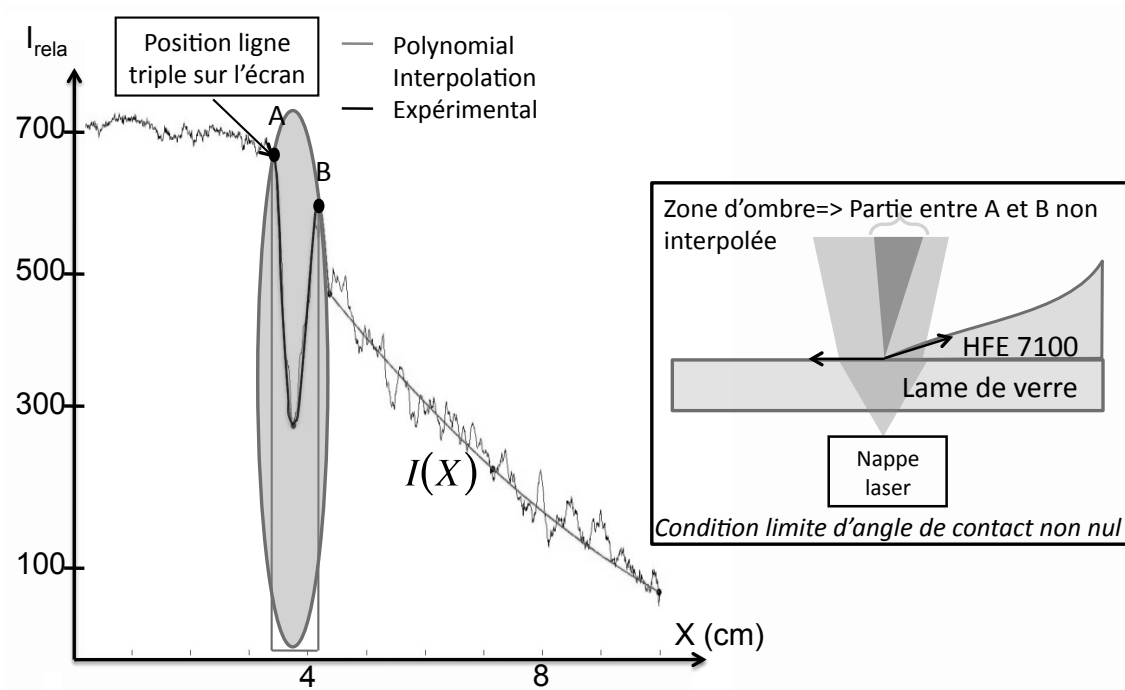


FIGURE 2.5 – Interpolation du signal d'intensité lumineuse

2.2.3.3 Intégration du signal d'intensité lumineuse

Le but de cette étape est de calculer l'angle incident des rayons constituant la raie laser centrale avec la verticale lorsque ceux-ci impactent l'écran. Pour calculer l'angle noté θ_{screen} sur la figure 2.6, une loi de conservation d'énergie est utilisée. Donc la formulation suivante est correcte si toute l'énergie électromagnétique provenant de la diode laser impacte l'écran. Dans ce cas, on considère que la transmissivité du fluide, capacité à se laisser traverser par la lumière, est proche de l'unité. La perte d'énergie due aux multi réflexions est aussi considérée comme négligeable.

Comme cela est représenté sur la figure 2.6, une loi de conservation de l'énergie est définie par la formule suivante :

$$I_0 dx = I(X) dX \quad (2.3)$$

Cela veut dire que toute l'énergie électromagnétique traversant l'interface à travers l'élément noté " dx_i " sur la figure 2.6 impacte l'écran à travers l'élément " dX_s " sur la figure 2.6.

L'intensité lumineuse incidente est supposée constante tout au long du puits. Ceci est vrai si les rayons lumineux incidents sont quasi-parallèles.

Une description géométrique nous donne la relation liant la position sur le rayon du puits

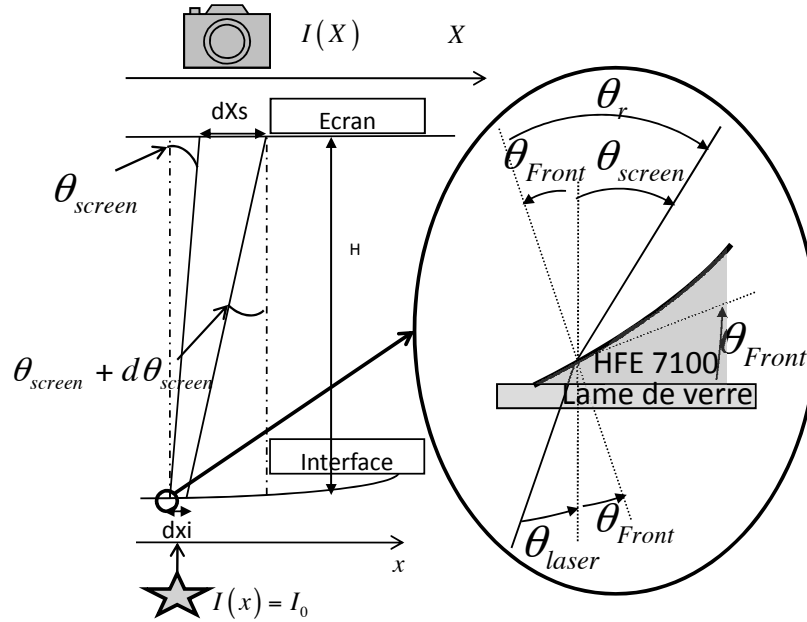


FIGURE 2.6 – Conservation de l'énergie lumineuse et chemin d'un rayon lumineux

" x " et la position du rayon lumineux correspondant sur l'écran " X " associée à un angle d'incidence θ_{screen} (Cf notation figure 2.6) :

$$x = X - H \tan \theta_{screen}(X) \quad (2.4)$$

A l'aide de la figure 2.6, on arrive à l'expression suivante :

$$dX = H(\tan(\theta_{screen} + d\theta_{screen}) - \tan(\theta_{screen})) + dx \quad (2.5)$$

En injectant l'équation 2.3 dans l'équation 2.5 on obtient :

$$\frac{d(\tan \theta_{screen})}{d\theta_{screen}} d\theta_{screen} = \frac{1}{H} \left(1 - \frac{I(X)}{I_0} \right) dX \quad (2.6)$$

La partie de gauche de l'équation 2.6 peut être analytiquement intégrée. La partie de droite est numériquement intégrée, $I(X)$ étant le signal d'intensité lumineuse issue de l'acquisition numérique. L'intégration numérique de ce membre se fait à partir de l'image sur l'écran du premier rayon voyant le fluide c'est à dire, à partir de la position du point "B" de la figure 2.5 jusqu'à la position "X" sur l'écran. Ainsi, l'équation 2.6 devient :

$$\tan \theta_{screen}(X) - \tan \theta_0 = \frac{1}{H} \int_{X_B}^X \left(1 - \frac{I(u)}{I_0}\right) du \quad (2.7)$$

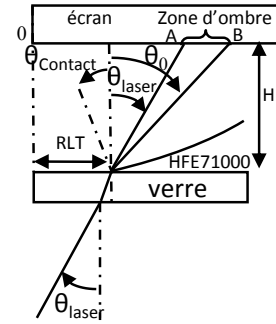
L'équation 2.7 nous donne la valeur de l'angle θ_{screen} en fonction de la variable X . Grâce à cette équation, on peut désormais calculer l'équation 2.4. Désormais, on a la fonction $X = f(x)$. Ce qui nous donne accès aux valeurs de θ_{screen} en fonction de la variable x , abscisse le long du rayon du puits.

Après l'intégration analytique du membre de gauche de l'équation 2.6, une constante $\tan \theta_0$ apparaît. L'angle θ_0 correspond à l'angle que forme l'axe de la verticale avec la direction du premier rayon lumineux voyant le fluide au niveau de la ligne triple après réfraction de celui-ci à travers l'interface. Cet angle s'exprime par la formulation suivante :

$$\overline{OB} - RLT = H \tan \theta_0$$

Donc :

$$\tan \theta_0 = \frac{\overline{OB} - RLT}{H} \quad (2.8)$$



Le point "O" est la position de l'axe de symétrie et le point "B" est détecté à partir du signal d'intensité lumineuse. Le calcul de la distance \overline{OB} est immédiat.

Détermination de l'angle de contact :

L'angle de contact est déterminé par l'expression suivante :

$$\theta_{Contact} = \frac{\overline{AB}}{(n_{HFE7100} - 1) (H + \tan^2 \theta_{laser} + \overline{AB} \tan \theta_{laser})} \cong \frac{\overline{AB}}{H (n_{HFE7100} - 1)} \quad (2.9)$$

La démonstration de cette équation est fournie en annexe 2.

2.2.3.4 Calcul de la forme de l'interface

Dans cette étape, on cherche à calculer la valeur de l'angle que forme la tangente à l'interface avec l'horizontale ($\tan \theta_{Front}(x)$). Les notations utilisées sont celles des variables illustrées à la figure 2.6.

Par des considérations géométriques et grâce aux lois de l'optique géométrique, on obtient l'expression suivante :

$$\tan \theta_{Front}(x) = \frac{n_{HFE7100} \sin \left(\frac{\theta_{laser}(x)}{n_{HFE7100}} \right) - \sin \theta_{Screen}(x)}{\cos \theta_{Screen}(x) - n_{HFE7100} \cos \left(\frac{\theta_{laser}(x)}{n_{HFE7100}} \right)} \quad (2.10)$$

La démonstration de cette expression se trouve dans l'annexe .2.

θ_{laser} est l'angle que forme le rayon de la nappe laser au point d'impact x sur le substrat. Afin de déterminer le profil de l'interface le long du rayon du puits, il suffit d'intégrer l'expression 2.10 à partir de la position de la ligne triple.

$$z(x) = \int_{RLT}^x \tan \theta_{Front}(u) du \quad (2.11)$$

2.2.3.5 Reconstitution de l'interface loin de la ligne triple : au voisinage de la paroi du puits d'évaporation

L'équation 2.11 ne nous permet pas de reconstituer l'interface en proximité de la paroi du puits d'évaporation car la nappe laser, légèrement triangulaire, est, à ce niveau là, bloquée. Ainsi, afin de prolonger le profil de l'interface jusqu'à la paroi du puits, nous extrapolons le profil obtenu avec l'équation 2.11 en utilisant l'équation de Laplace-Young :

$$\Delta P = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.12)$$

Dans cette équation, R_1 est le rayon de courbure dans le plan axisymétrique. R_2 est le rayon de courbure dans le plan orthogonal au plan axisymétrique. Par conséquent, R_2 correspond à la distance que constitue le point considéré avec l'axe de symétrie divisée par le cosinus de l'angle que forme la normale à l'interface avec l'horizontal, donc $R_2 = \frac{x}{\|n_x\|}$ (Cf schéma ci-dessous). De plus, on considère que $\frac{\Delta P}{\gamma}$ est constant tout au long du profil. Ainsi on détermine la valeur de cette constante avec la dernière valeur de x appelé x_{fin} et de R_1 appelé R_{fin} du profil reconstitué avec l'équation 2.11. C'est une approximation forte. En réalité la courbure n'est pas constante. Cela peut avoir des conséquences non négligeables sur la forme du profil reconstitué.

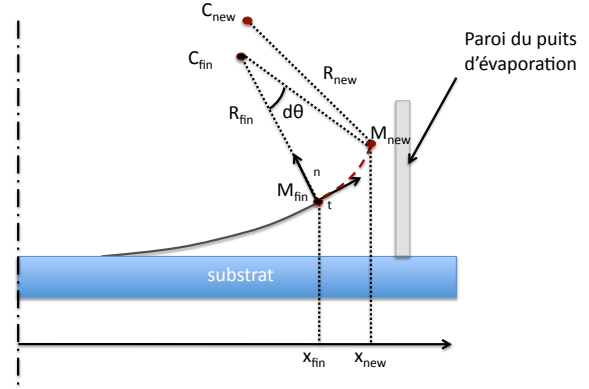
$$\beta = \frac{\Delta P}{\gamma} = \frac{1}{R_{fin}} + \frac{\|n_{x_{fin}}\|}{x_{fin}} \quad (2.13)$$

$\|n_{x_{fin}}\|$ est la composante selon l'axe horizontal de la normale à l'interface au point " x_{fin} ".

Ensuite, on détermine le centre du cercle passant par le dernier point du profil correspondant à l'équation 2.11 C_{fin} , puis on calcule le nouveau point M_{new} de l'interface par rotation d'un angle $d\theta$, de centre C_{fin} et de rayon R_{fin} . On considère un pas sur l'abscisse curviligne constant. Puis on calcule le nouveau rayon de courbure R_{new} , correspondant au rayon de courbure de l'interface à l'abscisse x_{new} , à partir de l'équation de Laplace-Young par l'expression suivante :

$$R_{new} = \frac{\frac{x_{new}}{\|n_{x_{new}}\|}}{\frac{x_{new}}{\|n_{x_{new}}\|}\beta - 1} \quad (2.14)$$

Puis on recommence jusqu'à ce que x_{new} soit égal au rayon du puits d'évaporation.



2.3 Validation de la méthode de reconstruction de l'interface

Dans cette partie, nous allons mettre en évidence les différentes validations de la méthode qui ont été réalisées.

La première forme de validation est numérique. A l'aide d'un logiciel de lancé de rayon développé dans le cadre de l'expérience, celle-ci a été numériquement reproduite puis le profil numérique d'intensité lumineuse est calculé puis comparé avec le profil expérimental. Le profil d'interface utilisé est celui obtenu à partir de la théorie décrite précédemment. D'un point de vue chronologique dans l'évolution des travaux, c'est le développement de ce logiciel de lancer de rayon qui a inspiré la théorie d'inversion. Les résultats se sont avérés très satisfaisants, cependant cette méthode de validation ne permet pas de valider l'exactitude du signal d'intensité lumineuse recueilli. Cette validation est valable dans la mesure où le signal d'intensité lumineuse expérimental est validé, c'est-à-dire si le dispositif d'acquisition lumineuse mesure correctement l'intensité lumineuse relative de la raie laser.

Dans un second temps, la méthode a été validée sur un film à géométrie connue. Pour ce faire, nous avons utilisé un ménisque solide (lentille plan concave percée reproduisant un film en évaporation) à géométrie imposée avec ligne triple au centre. L'indice de réfraction du ménisque est connu.

Cette validation ne concordait pas avec la première. Cela nous a amené à réfléchir à la mise au point d'un protocole performant afin d'étalonner le dispositif d'acquisition numérique quantifiant l'intensité lumineuse relative des raies lasers. C'est pourquoi la partie qui suit est organisée de la façon suivante :

Dans un premier temps, nous allons expliquer et comparer les deux méthodes d'étalonnage utilisées pour le dispositif d'acquisition de l'intensité lumineuse. Puis nous allons présenter

le logiciel de lancé de rayon ainsi que la validation numérique qui en découle. Ensuite nous illustrerons les résultats obtenus sur un film à géométrie connue pour conclure sur l'estimation de l'erreur de mesure de la méthode.

Enfin, dans le cadre d'une expérience utilisant simultanément la méthode de reconstitution de l'interface et une pesée en temps réel, nous tenterons de valider la méthode d'un point de vue dynamique.

2.3.1 Etalonnage du dispositif d'acquisition numérique

Dans le protocole expérimental décrit dans la section 2.2.1, on a vu que le signal d'intensité lumineuse était recueilli à l'aide d'un dispositif d'acquisition numérique qui numérise sur 8 bits l'image observée sur l'écran. Un étalonnage de ce dispositif est nécessaire si la relation entre l'intensité lumineuse incidente et la valeur en niveaux de gris numérisée n'est pas linéaire. Avec le dispositif d'acquisition utilisé, Nikon D-300, cette relation n'est pas linéaire. Une courbe d'étalonnage est donc nécessaire. Afin de déterminer cette courbe d'étalonnage, deux méthodes ont été explorées.

La première méthode consiste à regarder la réponse du dispositif d'acquisition à une nappe laser pour différentes hauteurs d'écran. On peut ainsi en déduire une relation entre l'intensité lumineuse incidente et la réponse en niveau de gris du dispositif numérique. La seconde technique est inspirée des méthodes utilisées en imagerie infra rouge dite NUC "Non-Uniformity Correction" qui permet, en plus de déterminer la courbe d'étalonnage, d'atténuer le bruit statique.

2.3.1.1 Méthode d'étalonnage par correction globale des capteurs CMOS

Afin d'étalonner la réponse en niveau de gris de la matrice des capteurs CMOS du dispositif d'acquisition, une nappe laser a été générée. Pour différentes hauteurs d'écran, la réponse en niveau de gris du Nikon D-300 a été calculée par sommation de tous les pixels constituant la raie laser en largeur et en hauteur. Une valeur moyenne I_{CCD} est alors déterminée puis associée à l'intensité lumineuse relative incidente déterminée de la façon suivante :

" S_i " est la surface sur l'écran de la raie laser

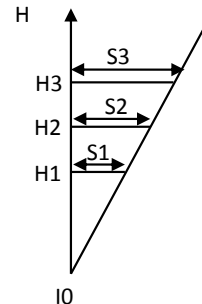
La conservation de l'énergie lumineuse nous amène à la relation suivante :

$$I_0 = i_1.S_1 = i_2.S_2 = i_3.S_3$$

Donc,

$$i_i = \frac{I_0}{S_i} \Leftrightarrow \frac{i_i}{I_0} = \frac{1}{S_i}$$

Ainsi, pour chaque hauteur d'écran on obtient une intensité lumineuse incidente qui corres-



pond à l'intensité lumineuse numérique I_{CCD} obtenue avec le dispositif d'acquisition. Pour la courbe 2.7, on trace en abscisse la valeur I_{CCD} et en ordonnée la valeur d'intensité incidente $\frac{i_i}{I_0}$ correspondante.

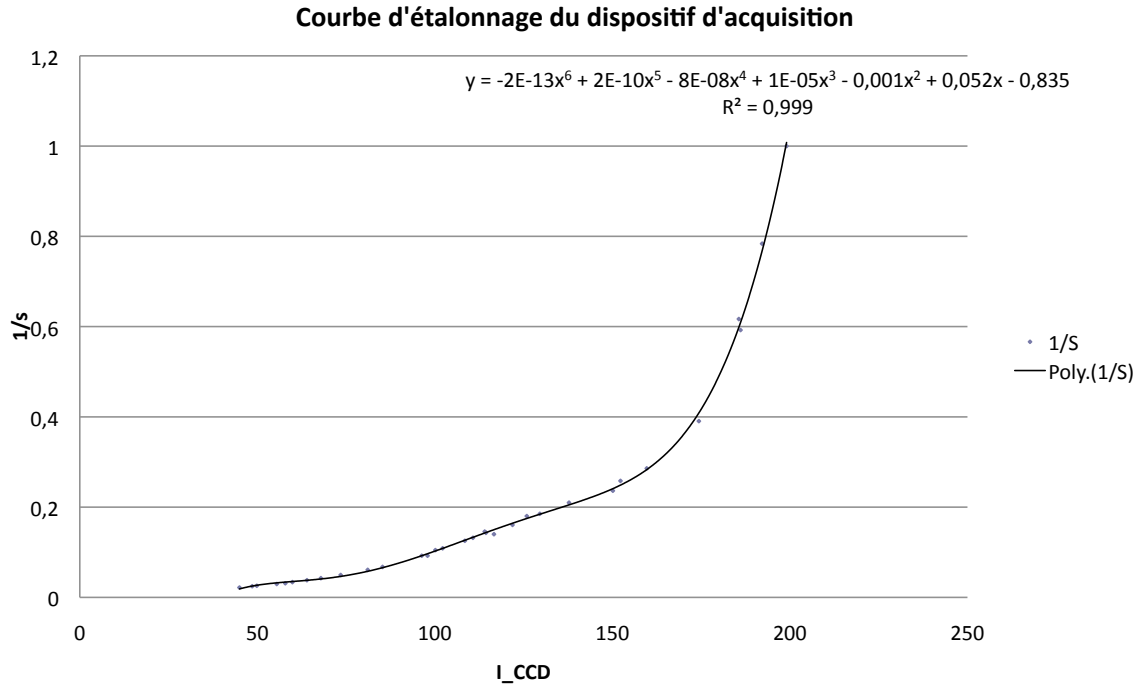


FIGURE 2.7 – Courbe d'étalonnage du dispositif d'acquisition numérique (mode Noir et Blanc)

Cette courbe a été obtenue en travaillant avec des images en noir et blanc. A partir des points obtenus, on détermine le polynôme d'interpolation correspondant, un polynôme d'ordre 6. On observe un comportement fortement non linéaire pour les valeurs de niveau de gris supérieures à 150. Ce comportement très asymptotique est plus prononcé en mode Noir et Blanc. Ainsi, en pratique, on essaye de ne pas avoir des valeurs de niveau de gris supérieures à 170. Cette méthode n'est pas très précise de part la difficulté à évaluer la largeur des raies lasers pour les faibles intensités lumineuses (grande hauteur d'écran).

2.3.1.2 Méthode d'étalonnage par correction locale des capteurs CMOS

Les caméras à matrice, comportant un grand nombre de pixels, donc de détecteurs, présentent un problème spécifique d'uniformité de réponse pour une même luminosité incidente. Cette non uniformité est caractérisée par le bruit spatial fixe.

Bruit spatial fixe

Lors d'une prise de vue d'une source lumineuse uniforme, le signal de la matrice CMOS est entachée d'un bruit invariant d'une image à l'autre. Ce bruit traduit la non-uniformité

des conversions flux lumineux / signal due aux disparités des caractéristiques des détecteurs CMOS. Par conséquent la réponse numérique à une incidence lumineuse uniforme n'est pas la même d'un capteur à l'autre. Ceci a été mis évidence à l'aide d'un écran Flox (figure 2.8). Cet écran, permet de générer une lumière rouge de longueur d'onde égale à 633 nm, ce qui est quasiment la longueur d'onde du laser utilisé. La particularité de cet écran est qu'il assure à 99 % l'uniformité spatiale de l'éclairement qu'il génère sur toute sa surface. On constate que pour une même luminosité, la réponse des capteurs peut varier du simple au quadruple. Cette variation est encore amplifiée après la transformation associée à la courbe d'étalonnage due à la réponse non linéaire des capteurs en fonction de la luminosité incidente.

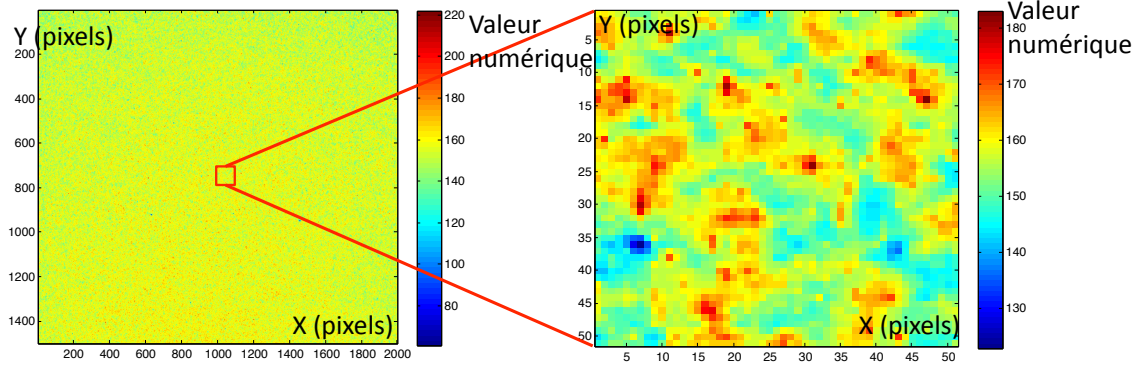


FIGURE 2.8 – Bruit statique de la matrice des capteurs CMOS

Afin d'apporter plus de justesse dans la mesure d'intensité lumineuse, il est donc nécessaire d'ajouter à la courbe d'étalonnage une correction locale des capteurs. Comme nous l'avons vu précédemment, la courbe d'étalonnage de ce type d'appareil est loin d'être une fonction linéaire. La détermination d'une seule matrice de correction est donc insuffisante pour corriger les non uniformités. L'idée est donc de déterminer une courbe d'étalonnage par pixel.

Détermination des matrices polynomiales par la méthode des moindres carrés

Pour réaliser cette courbe d'étalonnage pixel par pixel, nous avons utilisé un écran Flox que l'on a disposé au dessous de l'écran de visualisation. Le dispositif d'acquisition est focalisé sur l'écran de visualisation 2.9(a). Une autre particularité de l'écran Flox est que la luminance de celui-ci est linéairement réglable. Pour cette étalonnage, nous travaillons avec l'appareil photo en mode couleur puis nous nous intéressons à la composante rouge de l'image numérique obtenue. La réponse dans le rouge de l'appareil est moins asymptotique qu'en Noir et Blanc pour les grandes valeurs d'intensité lumineuse.

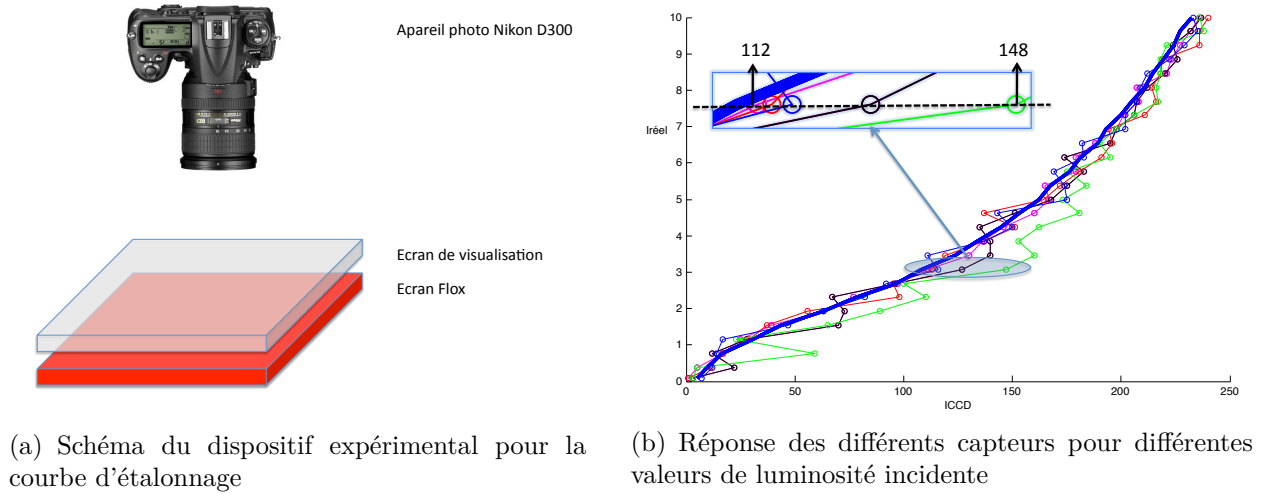


FIGURE 2.9 – Etalonnage

Grâce à ce dispositif, nous pouvons faire l'acquisition numérique de l'écran de visualisation pour différentes valeurs d'intensité lumineuse de l'écran Flox avec une intensité lumineuse relative de celui-ci connue. Par conséquent, on peut déterminer la courbe d'étalonnage mettant en relation les valeurs comprises entre 0 et 255 de la réponse des capteurs CMOS et l'intensité lumineuse incidente réelle. La courbe 2.9(b) représente l'intensité lumineuse incidente en fonction de la valeur numérique de certains des 12 millions de capteurs. Cette courbe met en évidence les disparités qu'il peut y avoir entre la moyenne de tous les capteurs (courbe bleu en gras) et chacun des capteurs (points "o").

Ainsi pour chaque capteur, on va déterminer le polynôme moindres carrés de degré 3 afin de déterminer la fonction polynomiale matricielle de degré 3. Conclusion, la courbe d'étalonnage devient :

$$X_{I_{Rela}} = A_3 \cdot X_{ICMOS}^3 + A_2 \cdot X_{ICMOS}^2 + A_1 \cdot X_{ICMOS} + A_0 \quad (2.15)$$

$X_{I_{Rela}}$ est la matrice d'intensité relative de chacun des pixels, A_i est la matrice de coefficients correspondant aux coefficient i du polynôme de degrés 3, X_{ICMOS} est la matrice des valeurs numériques des capteurs CMOS.

Grâce à cet étalonnage, le bruit statique généré par l'écran a été pris en compte. En effet, l'écran de visualisation peut générer un bruit statique supplémentaire si l'épaisseur de l'écran n'est pas parfaitement homogène. Par exemple une feuille de papier éclairée de façon uniforme laisse transparaître la lumière de façon fortement non uniforme. Cependant il réside un bruit dynamique dû en partie à la non uniformité temporelle du laser et à la non uniformité temporelle de la réponse des capteurs CMOS.

2.3.1.3 Quantification du bruit dynamique

Le bruit dynamique peut être dû à la variation temporelle du flux lumineux envoyé par le laser et à la variation temporelle de la réponse en tension des capteurs CMOS pour une même

intensité incidente. Afin de quantifier le bruit dynamique global du système laser-capteurs, une dizaine de photographies d'une raie laser a été prise. Puis les valeurs de la matrice CMOS ont été sommées sur une largeur de raie d'environ 50 pixels (largeur classique des raies sur l'écran) pour chaque image. Ainsi nous obtenons le graphe d'intensité lumineuse en fonction de la distance X_{ecran} pour chacune des images. Le bruit dynamique a donc été calculé en prenant la moyenne des amplitudes maximales par rapport à la moyenne. Ainsi il a été calculé que le bruit dynamique a une amplitude de 4% (figure 2.10) correspondant à une erreur de $\pm 2\%$ par rapport à l'intensité lumineuse moyenne du signal.

$$\frac{\Delta I}{I} = \frac{\max I - \min I}{\bar{I}} \quad (2.16)$$

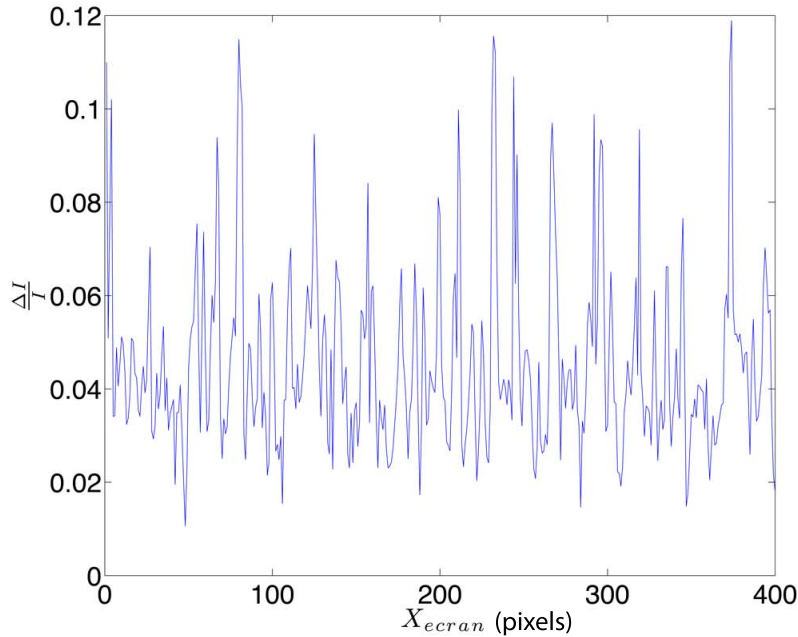


FIGURE 2.10 – Amplitude du bruit dynamique du système laser-aquisition

L'erreur globale induite par le bruit dynamique, sur la totalité de l'énergie lumineuse mise en jeu, obtenue par la sommation des valeurs de I le long de X_{ecran} , est de $\pm 1,5\%$.

Afin de minimiser le bruit dynamique, il est préférable de maximiser les temps d'expositions du dispositif d'acquisition. Pour ce faire, il faut minimiser la sensibilité ISO des capteurs et minimiser le diaphragme de l'appareil.

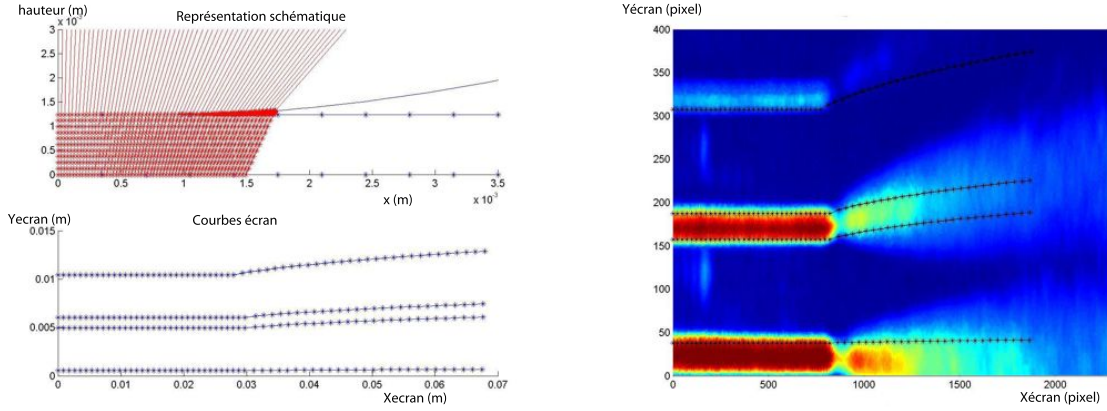
2.3.2 Validation numérique : logiciel de lancer de rayons

Afin de valider l'algorithme d'inversion décrit dans la partie 2.2, nous avons conçu un logiciel de lancer de rayon qui reproduit numériquement l'expérience. L'idée est de lancer des rayons constituant une nappe à partir d'une source laser virtuelle située à la même position que dans le protocole expérimental et avec le même angle de nappe. Les rayons traversent les mêmes dioptries que dans l'expérience réelle, c'est à dire le substrat (lame de verre), le liquide (HFE_{7100}) puis l'air et impactent un écran virtuel situé à la même position que dans l'expérience. Les rayons sont des droites dont le vecteur directeur est modifié selon la loi de Snell-Descartes à la rencontre des différents dioptries en fonction de l'angle d'incidence et de l'indice de réfraction du milieu visité. La validation de l'algorithme d'inversion avec le logiciel de lancer de rayons consiste en la comparaison du profil d'intensité lumineuse expérimental avec celui calculé à partir du lancer de rayon. Si les profils se superposent, alors l'algorithme d'inversion est juste et vérifié, selon ses hypothèses de validation.

2.3.2.1 Discrétisation de l'interface

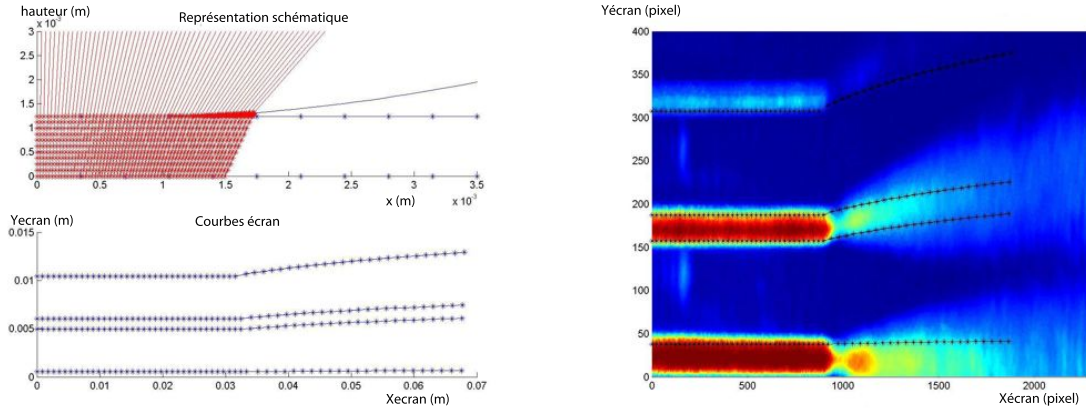
L'algorithme d'inversion nous renvoie un ensemble de points constituant le profil de l'interface. A partir de ces points nous créons des éléments finis de façon à avoir, grâce aux fonctions de forme de ceux-ci, une équation continue de l'interface. Une équation continue de l'interface est nécessaire pour déterminer le point d'intersection entre un rayon et l'interface. En ce point d'intersection, la loi de Snell-Descartes est appliquée afin de déterminer la trajectoire du rayon en sortie de l'interface. Cette loi nécessite la connaissance de la normale à l'interface et la trajectoire de sortie du rayon dépend fortement de cette valeur. Ainsi la sensibilité à la normale est très importante. C'est pourquoi, il est judicieux de prendre des éléments finis de classe C^1 , assurant la continuité des tangentes.

L'interface est donc discrétisée par des éléments finis surfaciques en deux dimensions de type Hermite. L'interface discrétisée est donc une surface en deux dimensions. En effet, à partir du profil d'interface obtenu avec l'algorithme d'inversion, en supposant le problème axisymétrique, on peut déduire le profil tridimensionnel de l'interface. Le logiciel de lancer de rayon est en trois dimensions d'espaces. Cela permet de recréer les nappes lasers secondaires qui ne sont pas dans le plan diamétral de la cellule d'étude. L'exploitation de ces nappes reste pour l'instant uniquement qualitatif. La figure 2.11 montre que la superposition des nappes secondaires est plutôt satisfaisante.



(a) Représentation schématique 2D du lancer de rayon au temps t . L'expérience est numériquement reproduite. Les courbes écran représentent l'impact des rayons lumineux sur un écran virtuel

(b) Superposition des nappes numériques et réelles au niveau de l'écran au temps t . La trace des rayons lumineux numériques sur l'écran est représenté par les points en noirs.



(c) Représentation schématique 2D du lancer de rayon au temps $t + \Delta t$

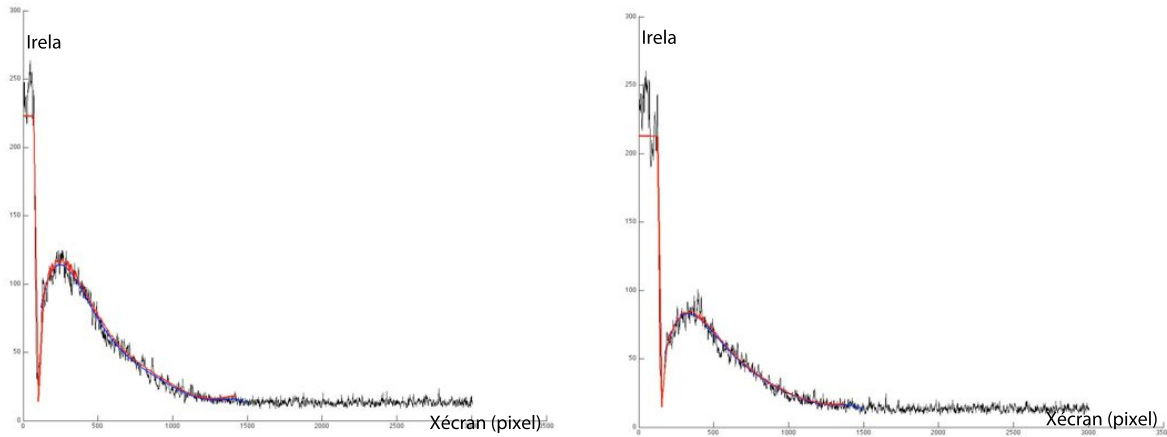
(d) Superposition des nappes numériques et réelles au niveau de l'écran au temps $t + \Delta t$

FIGURE 2.11 – lancer de rayon vs image expérimentale

2.3.2.2 Résultats

D'un point de vue quantitatif, nous calculons l'intensité lumineuse numérique des rayons au niveau de leur intersection avec l'écran. Les images de la figure 2.11 montrent les points d'intersections des rayons lancés numériquement avec l'écran.

Pour une nappe laser, nous calculons l'intensité lumineuse numérique relative comme l'inverse de la distance sur l'écran entre deux points voisins. Afin de comparer cette intensité numérique relative avec l'intensité lumineuse relative expérimentale, nous effectuons une transformation de similitude sur l'intensité numérique avec un coefficient de proportionnalité calculé en égalant l'intensité lumineuse correspondant à la zone sèche. Les résultats sont très satisfaisants. La figure 2.12 en est un extrait.



(a) Superposition des profils d'intensité numérique et expérimentale au temps t

(b) Superposition des profils d'intensité numérique et expérimentale au temps $t + \Delta t$

FIGURE 2.12 – lancer de rayon vs signal expérimental. L'intensité expérimentale est représentée par le signal noir, l'intensité interpolée par la courbe bleu et l'intensité numérique par la courbe rouge

La superposition du profil du signal d'intensité lumineuse expérimental avec le profil d'intensité numérique nous permet de valider les équations de l'algorithme d'inversion.

2.3.3 Validation des hypothèses de l'algorithme d'inversion optique

La méthode d'inversion décrite et validée se base sur certaines hypothèses, à savoir, la transmissivité des films égale à l'unité et l'invariance en température des grandeurs physiques. Le domaine de validité de ces hypothèses est étudié dans cette partie.

2.3.3.1 Hypothèse sur la conservation de l'énergie lumineuse : transmissivité égale à l'unité

On a vu dans la partie 2.2.3.3 que l'équation 2.3 était valable si la transmissivité du fluide était proche de l'unité. Afin de vérifier cette hypothèse, nous allons quantifier l'intensité lumineuse du signal avec liquide pour une dizaine d'images. Pour calculer l'intensité lumineuse du signal avec liquide, nous allons sommer les valeurs d'intensité lumineuse de l'image du signal après la transformation relative à la courbe d'étalonnage de l'équation 2.15. Ensuite nous allons comparer cette valeur totale de l'énergie lumineuse mise en jeux avec le Laser, avec la sommation obtenue d'une image correspondant à une configuration sans liquide. Si cette sommation est la même avec et sans liquide, alors la transmissivité du liquide est égale à l'unité car toute l'énergie lumineuse a traversé le fluide. En l'occurrence, nous retrouvons en moyenne la même valeur d'intensité lumineuse totale que dans le cas sans fluide à $\pm 5\%$ près dans le cadre du HFE_{7100} . Le bruit dynamique quantifié dans la partie 2.16 était de $\pm 2\%$. On peut donc conclure que la transmissivité du HFE_{7100} est proche de 1 à $\pm 3\%$ près. Les mêmes validations ont été faites avec un film solide en verre et l'énergie lumineuse totale était inférieure au cas sans liquide. C'est pourquoi un coefficient de transmissivité $\beta < 1$ est appliqué à l'équation 2.3 qui devient :

$$\beta I_0 dx = I(X) dX \quad (2.17)$$

Ce coefficient est calculé comme étant le rapport de l'énergie totale avec le film solide sur l'énergie totale sans le film solide.

Cette perte d'énergie peut s'expliquer par des réflexions lumineuses aux différents dioptries. L'absorptivité des verres utilisés est très faible et donc négligeable. Ce n'est pas la cause de ce rapport d'énergie inférieur à 1.

2.3.3.2 Influence de la variation d'indice de réfraction due à la température sur le profil de l'interface

Pour le fluide utilisé, HFE_{7100} , l'indice de réfraction a une dépendance en température définie par l'expression suivante :

$$n_{HFE_{7100}} = 1.268679 - 0.000644 * T \quad T \text{ en } ^\circ\text{C} \quad (2.18)$$

Un indice de réfraction dépendant de la température a été simulé dans l'algorithme d'inversion. Un gradient de $3,3 \cdot 10^5 K.m^{-1}$ a été simulé au voisinage de la ligne triple sur une distance de $30 \mu m$. Cela revient à avoir une différence de 10° sur $30 \mu m$ au voisinage de la ligne triple. Ceci correspond à une variation d'indice de $5,8 \cdot 10^{-3}$. Aucune différence n'est observée.

2.3.4 Validation sur film à géométrie connue

Afin de valider l'algorithme d'un point de vue plus expérimental que la validation numérique décrite précédemment, nous l'avons appliqué sur un film à géométrie connue à savoir un ménisque en verre usiné par une entreprise spécialisée.

L'entreprise Optique Maris Delfour a usiné un ménisque solide en verre de type BK 7, dont l'indice de réfraction vaut : 1,51. Les dimensions de ce ménisque sont représentées sur la figure 2.13.

Pour ce test, le coefficient d'absorption β défini par l'équation 2.17 est de 0,77.

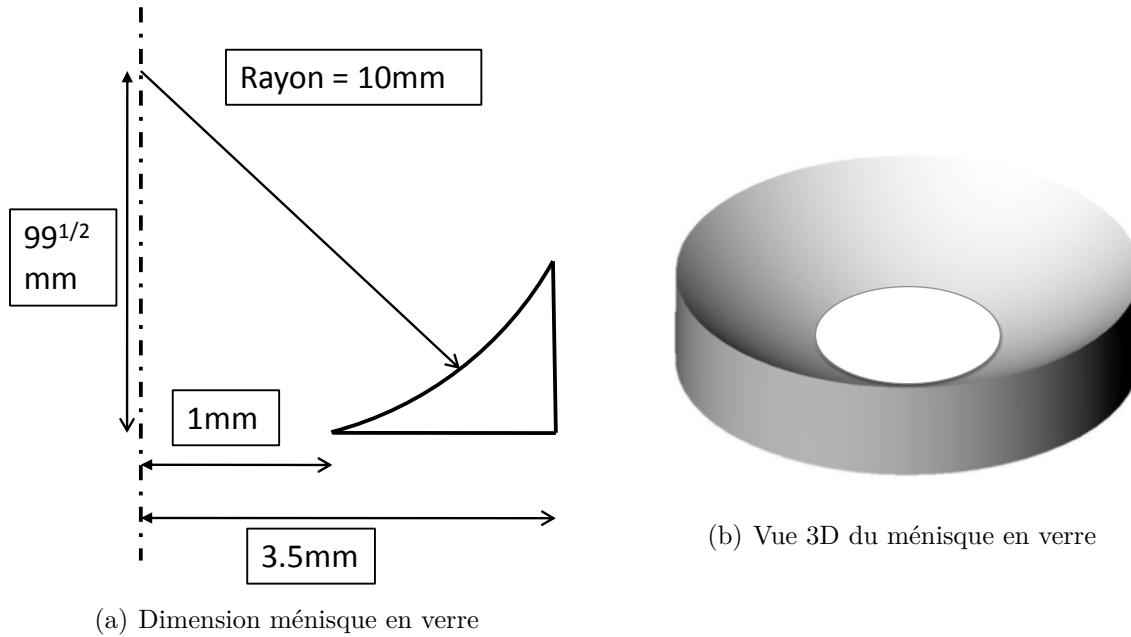


FIGURE 2.13 – Ménisque en verre

Sur ce ménisque, le rayon de courbure a une valeur de 10 mm et l'angle de contact au niveau du ménisque dont l'expression analytique en référence à la figure 2.13(a) est $\arctan\left(\frac{1}{99^{1/2}}\right)$ a une valeur de 0,10 rad.

Après réception du ménisque, ses cotations ont été vérifiées par ellipsométrie au laboratoire d'astrophysique de Marseille (LAM). Le rayon de courbure y a été mesuré 5 fois. Les résultats sont les suivants (en mm) : $\{10, 109; 10, 111; 10, 110; 10, 110; 10, 111\}$. La figure 2.14 montre les franges d'interférences ainsi que le trou central représentant la "zone sèche".

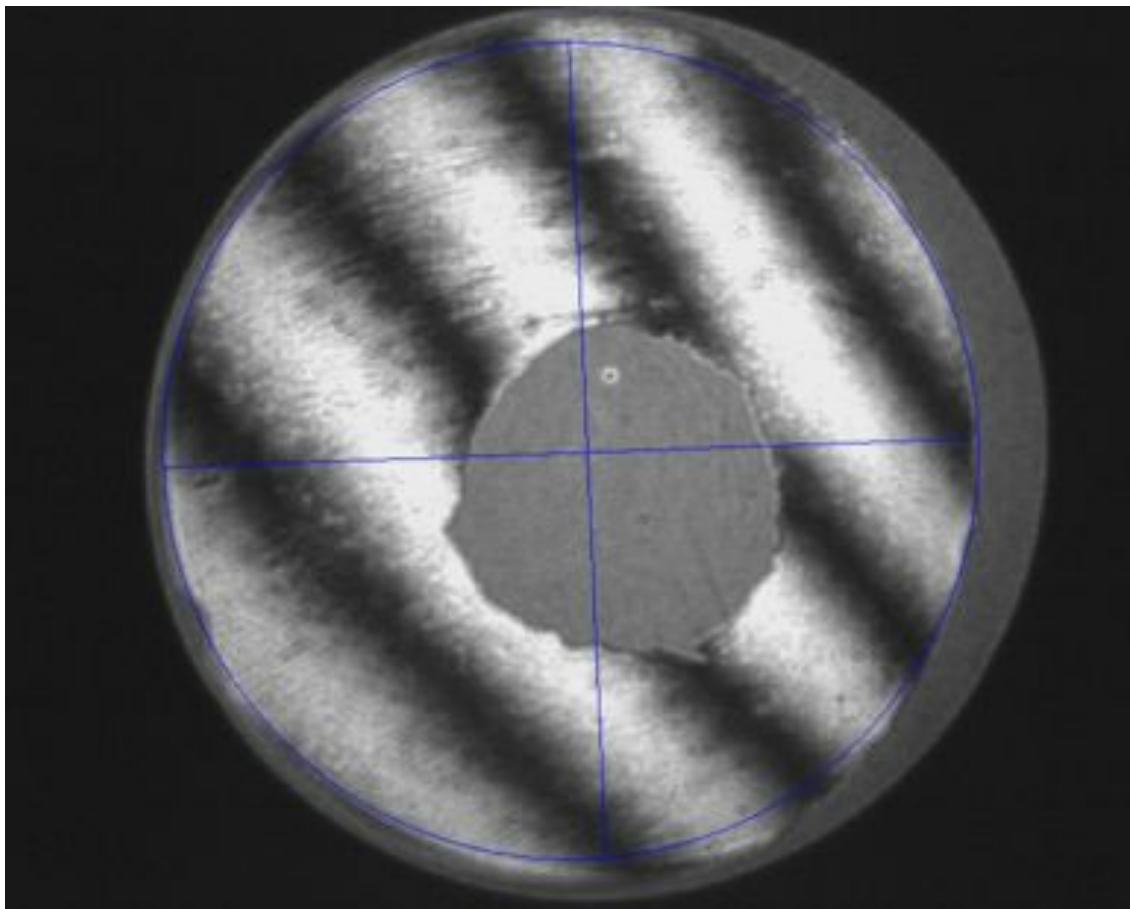


FIGURE 2.14 – Franges d'interférences obtenues par ellipsométrie sur le ménisque en verre.

Afin de réaliser cette mesure, la lentille devait être à la verticale et maintenue avec un cache inférieur au grand diamètre de la lentille. C'est pourquoi le trou central représentant la "zone sèche" n'est pas au centre de l'image. Le centre du cache n'est pas dans l'axe du centre de la lentille. Cependant, cela n'affecte pas la mesure du rayon de courbure. Toutefois, on constate que le trou central de la lentille comporte quelques imperfections qui peuvent influencer sur le diamètre théorique de la ligne triple et également sur l'angle de contact.

Dans le cadre de l'expérience d'inversion optique, le diamètre de la lentille étant moins large que la trace des raies au niveau du substrat, une rondelle de même diamètre intérieur servant

de cache (équivalent au puits d'évaporation) a été déposée autour de la lentille. Le cache est quasiment parfaitement aligné avec l'axe optique des raies lasers dans cette expérience. En effet, la différence du centre des raies lasers avec ou sans cache, n'est que d'un pixel au niveau de l'écran. Par conséquent, la position spatiale de l'axe optique $X_{optique}$ est défini comme étant le milieu du cache.

Afin de quantifier les imperfections du trou central de la lentille, une photo en vue de dessus a été faite avec un objectif macroscopique, figure 2.15 (résolution 1 pixel $\Leftrightarrow 7\mu m$). Sur cette image, la trace de la raie laser est représentée en rouge. Le centre de la lentille est $X_{lentille}$. La différence entre l'axe optique des raie laser (milieu de celles-ci) et du centre de la lentille n'est que de 2 pixels ($X_{lentille} - X_{optique}$) soit $14\mu m$. On peut donc clairement identifier où se situe l'impact de la raie laser avec la ligne triple du ménisque X_{LT} pour en déduire le rayon de ligne triple théorique $R_{LT} = X_{LT} - X_{lentille} = 1,31\text{ mm}$.

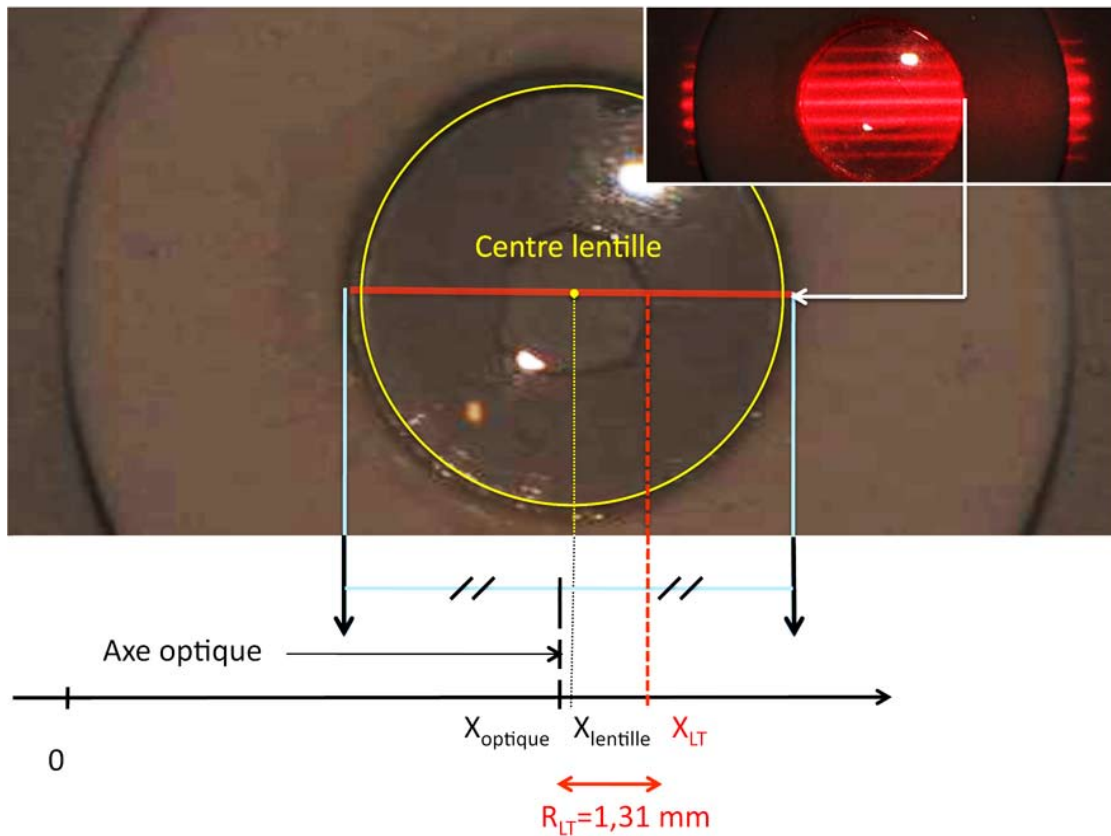


FIGURE 2.15 – Zoom sur ménisque en verre

La connaissance du rayon de ligne triple nous permet de calculer la position théorique de la ligne triple par rapport à l'axe optique ($R_{LT} + (X_{lentille} - X_{optique})$) ainsi que l'angle de contact théorique. L'angle de contact réel θ_c est calculé par l'expression suivante en prenant

comme valeur de *Rayon* de courbure la valeur de 10, 11 *mm*, valeur trouvée par ellipsométrie :

$$\theta_c = \arctan \frac{R_{LT}}{\sqrt{Rayon^2 - R_{LT}^2}} \text{ A.N : } 7,445^\circ \quad (2.19)$$

Nous avons désormais une connaissance assez précise du ménisque en verre grâce à cette image prise avec l'objectif macro. Sans que la position spatiale du ménisque avec celle des laser soit modifiée, la technique d'inversion optique a été testée sur ce ménisque. Notre référence sera l'axe optique qui constitue toujours le milieu des raies lasers. Nous allons donc quantifier l'erreur commise sur le profil du ménisque, sur l'angle de contact et sur la position de la ligne triple.

L'angle de contact calculé est $\theta_{c_{exp}} = 7.011^\circ$ ce qui représente une erreur de 0.45° (6%), l'erreur sur la position de la ligne triple est de 25 μm .

La figure 2.16 représente la superposition des profils théoriques de l'interface du ménisque, obtenue avec la connaissance du rayon de courbure théorique, de l'angle de contact réel et de la position de ligne triple réelle avec les grandeurs obtenues par la méthode d'inversion optique.

Sur cette figure, on a représenté par des points rouges et noirs le profil reconstitué en ajoutant ou soustrayant 2% au profil d'intensité lumineuse afin de voir l'effet du bruit dynamique sur le profil reconstitué. On voit que cet effet est négligeable et qu'une erreur initiale de 2% sur le profil d'intensité se traduit comme une erreur inférieure sur le profil d'interface.

Les figures 2.17(a) et 2.17(b) quantifient les erreurs commises sur le profil du ménisque et sur le rayon de courbure. L'erreur absolue est inférieure à $2.10^{-5} m$ ce qui représente une erreur relative inférieure à 1%. L'erreur relative faite sur le rayon de courbure est inférieure à 10%.

La courbure de l'interface est calculée de façon paramétrique par l'équation suivante :

$$\gamma = \frac{x'z'' - x''z'}{(x'^2 + z'^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (2.20)$$

Dans cette équation, x représente la position le long du rayon du puits d'évaporation et z la hauteur de film associée.

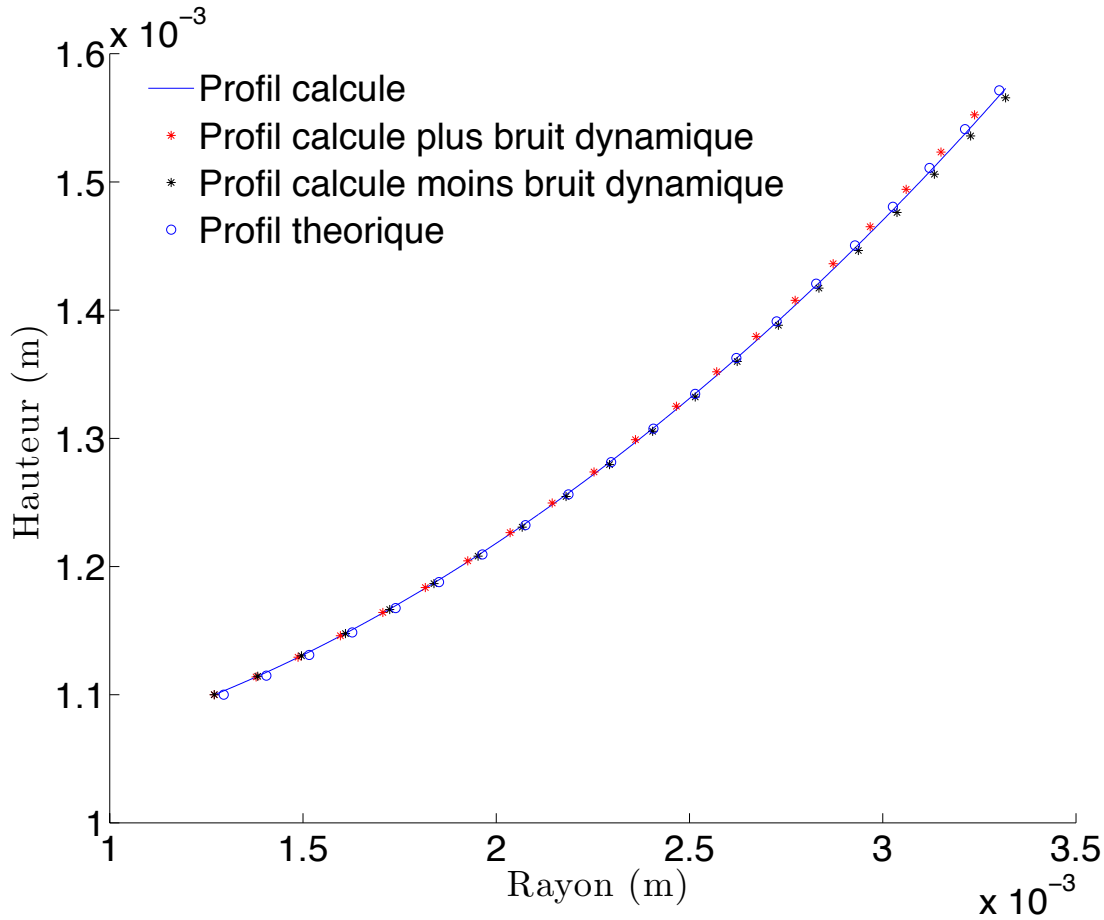
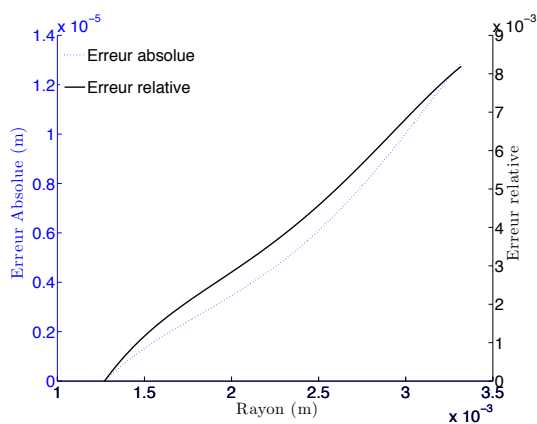


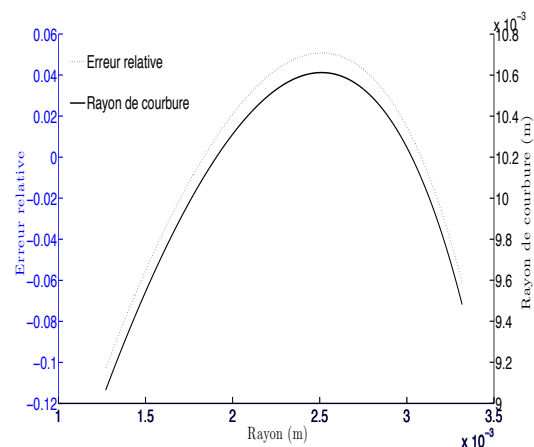
FIGURE 2.16 – Superposition des profils théorique et calculé de l'interface

2.3.5 Expérience de la pesée : Validation dynamique de la méthode

L'expérience suivante consiste à utiliser la méthode d'inversion optique afin de reconstituer la forme de l'interface et de faire en temps réel une mesure du poids du fluide contenue dans le puits de la cellule d'étude. Le fluide utilisé est du HFE_{7100} . Une quantité initiale de 25 micro-litres de HFE_{7100} est déversée dans le puits d'évaporation et comme cela a été évoqué dans la partie 1.4, l'interface de celui-ci prend la forme d'une lentille plan concave jusqu'à l'apparition d'une zone sèche délimitée par une ligne triple. Grâce à l'algorithme de la section 2.2.3, les nappes lasers déformées nous permettent de calculer la forme de l'interface liquide-gaz. A partir de cette forme de l'interface, nous pouvons calculer un volume de fluide donc une masse de fluide par révolution du profil d'interface. Cette masse sera appelée la masse géométrique de fluide " M_{geo} ". En même temps, nous connaissons la masse réelle de fluide contenue dans le puits grâce à une balance METLER Toldeo XS 205 Dual Range dont la précision est de 10^{-4} g. Cette masse sera appelée la masse mesurée. La figure 2.18 illustre le protocole expérimental de cette expérience. Nous pouvons donc comparer la masse mesurée du fluide en cours d'évaporation et la masse géométrique calculée à partir de la méthode



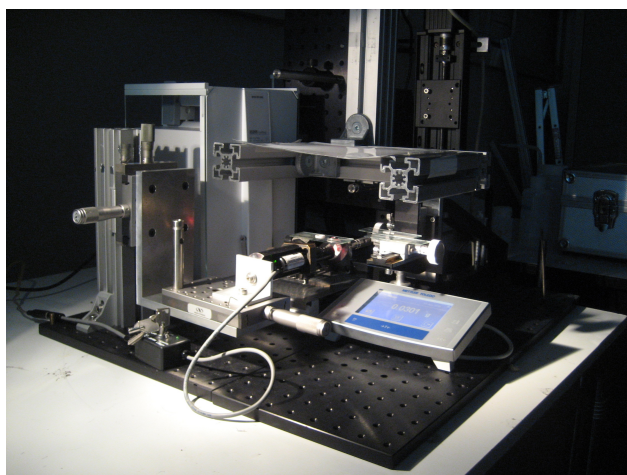
(a) Erreur relative sur le profil de l'interface du ménisque en verre



(b) Erreur relative sur le rayon de courbure de l'interface du ménisque en verre

FIGURE 2.17 – Erreur relative du profil de l'interface et de son rayon de courbure

d'inversion optique.



(a) Image du banc expérimental avec la balance



(b) Zoom sur le puits d'évaporation

FIGURE 2.18 – Dispositif expérimental avec l'expérience de pesée

La figure 2.19(a) illustre cette comparaison. Les résultats sont similaires. Avant l'apparition de la ligne triple, la masse géométrique se superpose parfaitement avec la masse mesurée,

cela découle du calcul de l'épaisseur de film décrit dans la partie application 2.5.

Dans les secondes qui suivent l'apparition de la ligne triple, on observe des profils de masses géométriques et mesurées qui sont semblables pendant 30 à 40 secondes. Puis, la masse géométrique devient considérablement surévaluée.

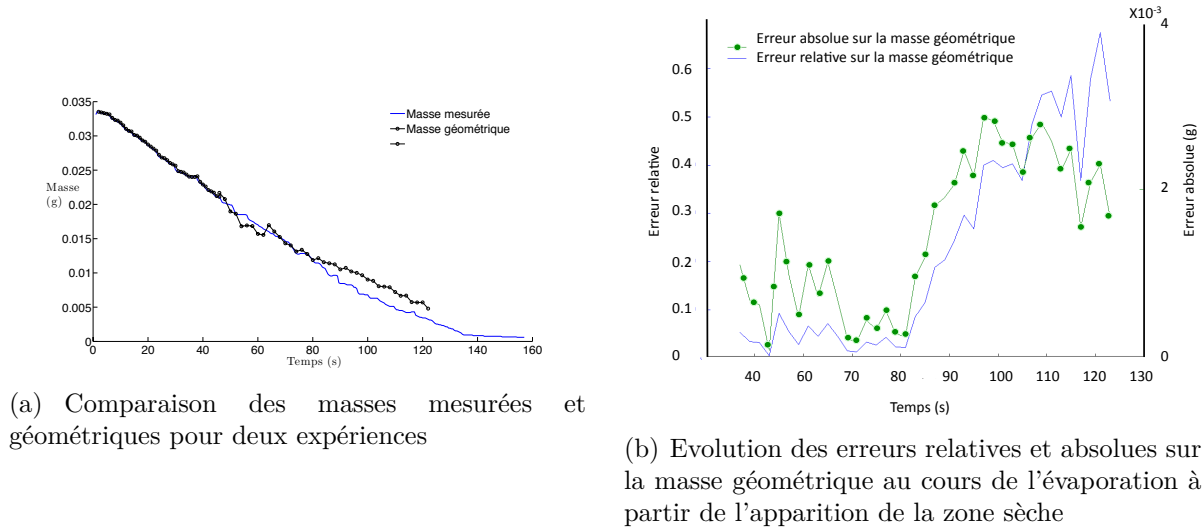


FIGURE 2.19 – Comparaison masse mesurée masse géométrique

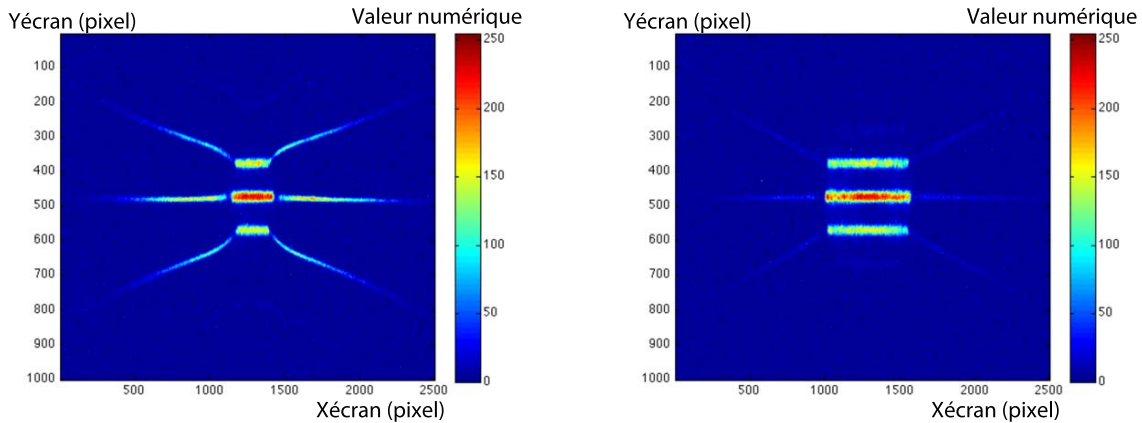
Le graphe 2.19(b) illustre de façon quantitative la comparaison entre la masse mesurée et la masse géométrique. L'axe des ordonnées situé sur la gauche du graphe quantifie l'erreur relative faite par la méthode d'inversion optique sur la masse géométrique à partir de l'apparition de la ligne triple. L'axe de droite représente l'erreur absolue. On voit que pendant les 35 secondes qui suivent l'apparition de la zone sèche, l'erreur relative faite par rapport à la masse mesurée est inférieure à 10 pour cent avec une précision sur la mesure inférieure à 2 milligrammes. A partir de la seconde 80, l'erreur relative augmente considérablement jusqu'à la valeur de 60 pour cent. Cependant la précision sur la mesure (donnée grâce à l'erreur absolue) reste inférieure à 3 milligrammes. Une des explications justifiant une erreur relative augmentant jusqu'à 60 pour cent tient du fait que la masse mesurée tend vers 0.

Une autre raison est que la proportion du signal reconstitué devient de plus en plus faible et l'erreur commise lors de la reconstitution totale du profil d'intensité avec l'équation de Laplace devient prépondérante. De plus cette partie du profil d'interface est la partie où l'épaisseur de film est la plus importante. Par conséquent une erreur d'interpolation sur cette partie du profil d'interface se répercute de façon importante sur le volume.

Cependant, ce ne sont pas les seules explications. On peut également voir ici une des limites de la méthode avec le matériel utilisé. En effet, à l'image de la figure 2.20, le signal d'intensité lumineuse expérimental des rayons lumineux ayant traversé le fluide devient de plus en plus faible au fur et à mesure que la zone sèche s'agrandit. La figure 2.20 montre une

image des nappes laser correspondant au temps $t = 65$ secondes de la courbe 2.26(b) et une autre image correspondant au temps $t = 110$ secondes de la même courbe. Ces images nous montrent que le signal lumineux des rayons ayant traversé le liquide devient plus faible en fin d'évaporation. Le dispositif d'acquisition travaille dans la limite de sa plage d'utilisation. Par conséquent, la numérisation du signal lumineux est fortement parasitée. De plus, à l'image de la courbe 2.9(b), on note que le bruit statique et dynamique est plus important dans les faibles valeurs de la matrice CMOS.

On pourrait travailler avec une sensibilité du dispositif d'acquisition plus grande, cependant celui-ci serait saturé pour les valeurs d'intensité lumineuse des rayons traversant la zone sèche. On comprend donc que selon la courbure et la tangente de l'interface, le signal lumineux recueilli sur l'écran peut prendre un large éventail de valeur. Afin de résoudre ce problème, un dispositif d'acquisition tolérant une très grande dynamique en intensité ainsi qu'un encodage numérique supérieur à 8 bits devient nécessaire.



(a) Valeur de la matrice CMOS de l'intensité lumineuse des nappes laser au temps $t=65$ s

(b) Valeur de la matrice CMOS de l'intensité lumineuse des nappes laser au temps $t=110$ s

FIGURE 2.20 – Différentes valeurs de la matrice CMOS au cours du processus d'évaporation

Toutefois, afin de palier à ce problème, dans la partie suivante, nous allons proposer une méthode permettant d'obtenir des images à plus grande dynamique avec le même dispositif d'acquisition.

2.3.6 Retour sur l'étalonnage : Génération d'images à grande gamme dynamique

Le dispositif d'acquisition, permettant la numérisation de l'intensité lumineuse visible au niveau de l'écran, encode le signal lumineux sur 8 bits. Par conséquent, il y a 256 valeurs

possibles, ce qui correspond à une gamme dynamique relativement faible. Or l'oeil est capable de distinguer une très large gamme d'éclairement. Pour un réglage donné, le dispositif d'acquisition n'est capable de distinguer qu'une partie de cette gamme (figure 2.21). Par conséquent, les valeurs d'éclairement en dehors de cette gamme seront mal quantifiées.

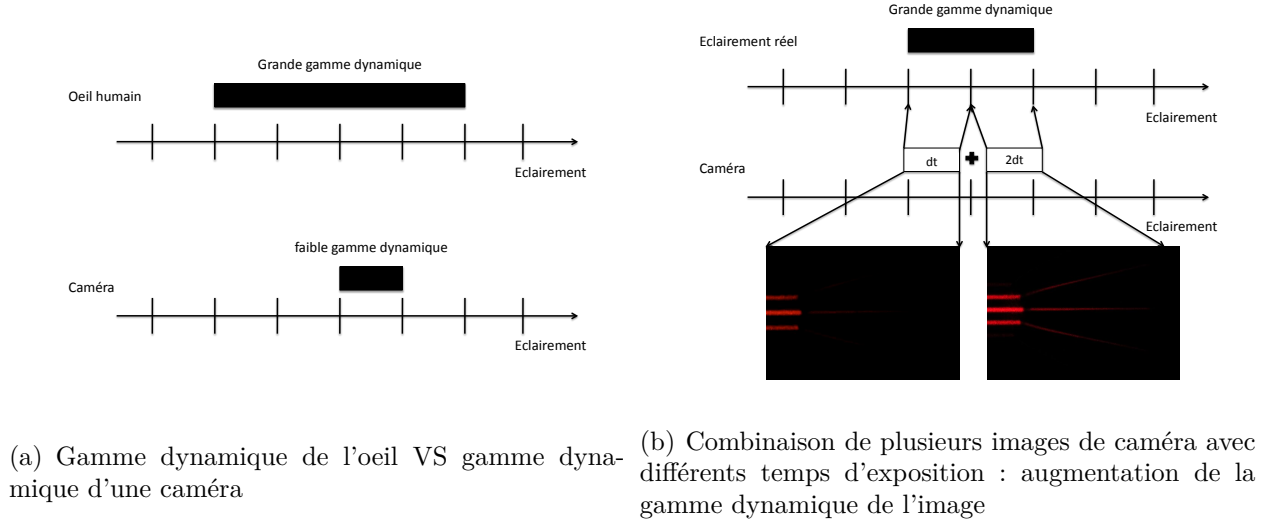


FIGURE 2.21 – Gamme dynamique de l'éclairement : principe d'une image à large gamme dynamique d'éclairement

Afin d'obtenir une dynamique plus grande, deux images avec des temps d'exposition différents sont prises successivement et recombinaées en une seule afin d'obtenir une image contenant une plus grande gamme dynamique sur les valeurs réelles de l'éclairement. Grâce à cette technique, toutes les valeurs d'éclairement des nappes lasers sur l'écran sont correctement quantifiées jusqu'à la fin du processus d'évaporation.

2.3.6.1 Notions sur l'éclairement

La courbe d'étalonnage f , déterminée par la méthodologie décrite dans la partie 2.3.1.2 nous donne la fonction reliant la valeur d'un pixel à un éclairement relatif de la scène. Cette courbe a été établie avec un temps d'exposition Δt_{ref} . Si les images n'ont pas été prises avec le temps d'exposition Δt_{ref} ayant servi à l'établissement de la courbe d'étalonnage, mais avec un temps d'exposition Δt_j alors pour cette image, l'éclairement du pixel i de la scène, x_{iRela} , est reconstitué de la manière suivante :

$$x_{iRela} = \frac{f(x_{iCMOS}) \Delta t_{ref}}{\Delta t_j} \quad (2.21)$$

Ainsi, avec une courbe d'étalonnage déterminée avec un temps d'exposition Δt_{ref} , on peut calculer l'éclairement de la scène si celle-ci a été prise avec un temps d'exposition Δt_j différent de Δt_{ref} .

2.3.6.2 Construction de la carte de radiosité de la scène

Les images prises avec des temps d'exposition courts vont être sensibles aux grandes valeurs d'éclairement mais pas aux faibles valeurs. A l'inverse, les images prises avec des temps d'exposition longs seront sensibles aux faibles valeurs d'éclairement et les grandes valeurs d'éclairements seront mal quantifiées car saturées. Afin de créer une image contenant l'information sur toutes les valeurs d'éclairement de la scène, une carte de radiosité (équation 2.22) est créée en pondérant chaque valeur d'éclairement des différentes images si les valeurs équivalentes en pixels ont un sens. Ces valeurs ont un sens si elles sont supérieures à 0 et inférieures à 255.

$$w_j = 1 \text{ si } 0 < x_{i_{CMOS}} < 255$$

$$w_j = 0 \text{ si non}$$

$$x_{i_{Rela}} = \frac{\sum_j w_j \frac{f(x_{i_{CMOS}}) \Delta t_{ref}}{\Delta t_j}}{\sum_j w_j} \quad (2.22)$$

Dans cette expression, w est la pondération binaire associée au pixel $x_{i_{CMOS}}$ et j correspond à l'image dont le temps d'exposition est Δt_j .

En pratique, on prend successivement deux photos (deux suffisent pour notre étude), l'une avec un temps d'exposition Δt et la seconde avec un temps d'exposition $2\Delta t$. Le mode "Bracketing" du Nikon D300 permet de modifier le temps d'exposition entre différentes images successives et il permet de prendre ces deux images avec un intervalle de temps de $\frac{1}{10}$ de seconde. Cet intervalle est largement inférieur au temps caractéristique de l'étude. En effet, les vitesses de ligne triple sont de l'ordre de $25 \mu m.s^{-1}$. Par conséquent, en $\frac{1}{10}$ de seconde, la ligne triple a bougé de $2,5 \mu m$ ce qui est en-dessous de la résolution de la méthode de mesure sur la position de la ligne triple.

Cette technique de génération d'image de plus large dynamique d'éclairement a pour avantage de parfaitement distinguer la fin des raies laser et quantifie de façon plus précise l'information relative à l'éclairement de la scène pendant le processus d'évaporation.

Les validations faites sur le ménisque en verre ont été faites avec cette méthode.

2.3.7 Limites de la méthode

Dans cette partie nous allons quantifier quels sont les angles de contact maximaux que l'on peut mesurer. Nous allons également revenir sur le coefficient de transmittivité β introduit dans l'équation 2.17. En effet, la théorie des phénomènes de réflexion-réfraction des ondes électromagnétiques à l'interface entre deux milieux, avec un indice de réfraction

différent prédit qu'une partie de l'amplitude de l'onde est réfléchié tandis que l'autre partie est réfractée. La proportion entre les amplitudes réfractées et réfléchies dépend des indices de réfraction des différents milieux et de l'angle d'incidence de l'onde. Les coefficients de Fresnel expriment les liens entre les différentes amplitudes.

2.3.7.1 Angle de contact maximal

L'angle de contact maximal que l'on peut mesurer avec cette méthode découle de l'expression de l'angle de réfraction limite au niveau de l'interface. Dans l'expression suivante, θ_0 correspond à l'angle incident de la nappe laser avec la verticale. On montre facilement que dans le cadre du HFE_{7100} , celui-ci s'exprime de la façon suivante :

$$\theta_{c_{max}} = \arcsin\left(\frac{1}{n_{HFE_{7100}}}\right) - \theta_0 \quad \text{A.N } 51,9^\circ \quad \text{si } \theta_0 = 0 \quad (\text{nappe parallèle}) \quad (2.23)$$

Dans les conditions d'utilisation de la méthode, l'angle maximal que forme la nappe laser avec la verticale $\theta_{0_{max}}$ est de 4° , par conséquent dans notre situation, $\theta_{c_{max}} = 47,9^\circ$. Au delà de cet angle, il y a réflexion totale des nappes laser.

2.3.7.2 Coefficients de Fresnel

Les coefficients de Fresnel quantifient la part de l'onde réfléchié et la part de l'onde réfractée en fonction de l'angle incident. Dans les expressions ci-dessous, les notations des angles sont les mêmes que celles utilisées dans la description de l'algorithme de la méthode d'inversion 2.2.3. On rappelle que θ_0 est l'angle incident de la nappe laser et θ_{Front} l'angle que forme la tangente à l'interface avec l'horizontale. L'expression du coefficient de réflexion en polarisation horizontale est la suivante :

$$R_s = \left(\frac{n_{HFE_{7100}} \cos((\theta_0 + \theta_{Front})) - \sqrt{1 - (n_{HFE_{7100}} \sin(\theta_0 + \theta_{Front}))^2}}{n_{HFE_{7100}} \cos((\theta_0 + \theta_{Front})) + \sqrt{1 - (n_{HFE_{7100}} \sin(\theta_0 + \theta_{Front}))^2}} \right)^2 \quad (2.24)$$

L'expression du coefficient de réflexion en polarisation verticale est la suivante :

$$R_p = \left(\frac{n_{HFE_{7100}} \sqrt{1 - (n_{HFE_{7100}} \sin(\theta_0 + \theta_{Front}))^2} - \cos((\theta_0 + \theta_{Front}))}{n_{HFE_{7100}} \sqrt{1 - (n_{HFE_{7100}} \sin(\theta_0 + \theta_{Front}))^2} + \cos((\theta_0 + \theta_{Front}))} \right)^2 \quad (2.25)$$

Les coefficients de transmission sont obtenus par conservation d'énergie :

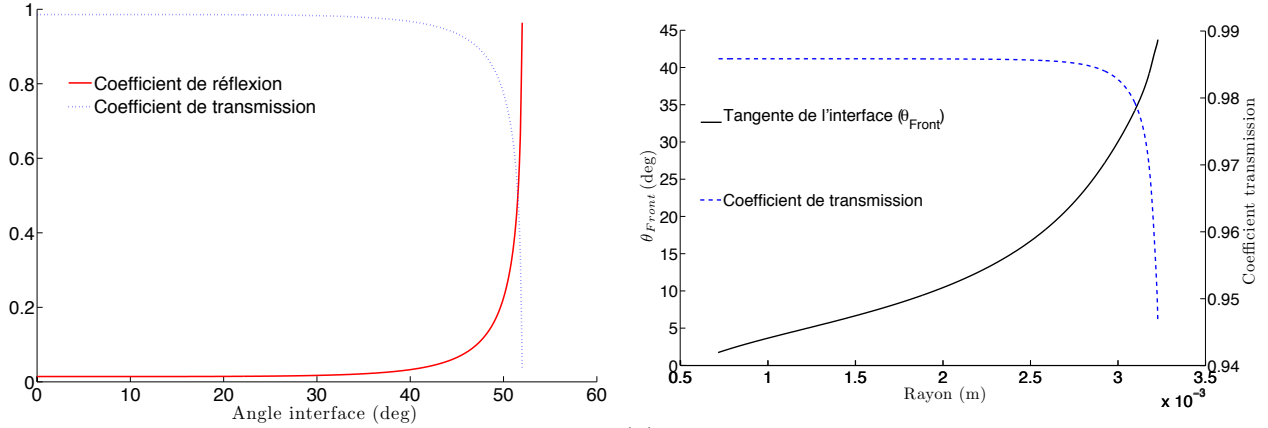
$$T_s = 1 - R_s \quad (2.26)$$

$$T_p = 1 - R_p \quad (2.27)$$

En cas de lumière non polarisée, les coefficients de réflexion et transmission moyens s'expriment par la moyenne des deux coefficients.

La courbe 2.22(a), représente l'évolution des coefficients de réflexion et transmission en fonction de l'angle θ_{Front} . Cette courbe illustre que dans notre situation, la partie du signal qui est réfléchi est relativement faible tant que l'angle θ_{Front} est inférieur à 40° . Au delà, jusqu'à l'angle de réfraction limite, le coefficient de réflexion augmente très rapidement.

La courbe 2.22(b) représente l'évolution de θ_{Front} (tangente de l'interface) à un moment du processus d'évaporation en fonction du rayon de puits d'évaporation. Sur cette courbe nous avons ajouté le coefficient de transmission associé à l'angle θ_{Front} en fonction du rayon. Dans cet exemple, le rayon interne du puits mesure $3,5 \text{ mm}$.



(a) Evolution des coefficients de Fresnel en fonction de la tangente de l'interface liquide-gaz (b) Angle que forme la tangente de l'interface avec l'horizontale et coefficient de Fresnel associé

FIGURE 2.22 – Influence des coefficients de Fresnel sur la transmittivité

La figure 2.22(b) illustre que la partie du signal réfléchi est inférieure à 2% tant que l'angle θ_{Front} est inférieur à 35° . Au dessus de 35° , la partie du signal réfléchi augmente considérablement. Cela illustre que la partie du signal réfléchi devient non négligeable pour une abscisse, le long du rayon du puits d'évaporation, supérieure à $2,5 \text{ mm}$. Pour une abscisse inférieure, celle-ci est négligeable. Par conséquent, en amont de cette valeur un coefficient $\beta = 0,99$ de l'équation 2.17 est justifié pour le HFE_{7100} .

2.4 Résultats obtenus à l'aide de la méthode

Dans la section 2.3, nous avons validé l'algorithme d'inversion optique qui permet de déterminer la forme de l'interface en zone proche de la ligne triple. Dans cette partie, nous allons illustrer quelques résultats que l'on peut obtenir grâce à cette méthode. La figure 2.23

montre l'évolution de l'interface à différents moments du processus d'évaporation. L'intervalle de temps entre les différents profils est de 10 secondes. Les parties des profils d'interface représentées en bleu sur la figure représentent la partie de l'interface directement reconstituée à partir du profil d'intensité lumineuse des nappes laser. Les parties en noir des profils d'interface représentent les zones où l'interface est reconstituée à l'aide de l'équation de Laplace [2.12](#).

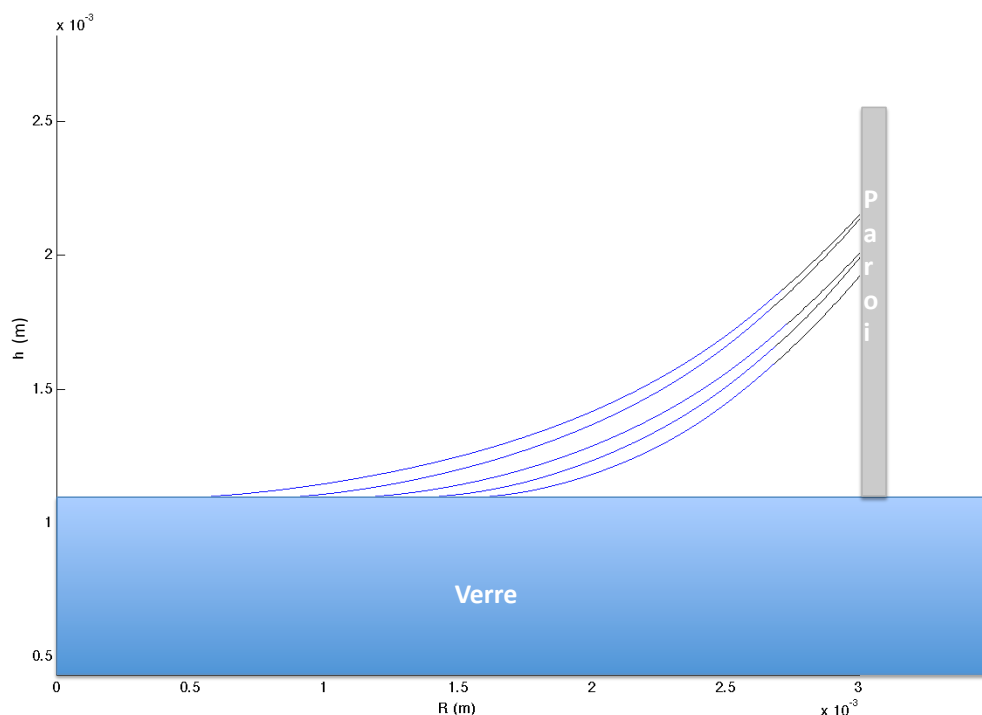


FIGURE 2.23 – Interface gaz-liquide à différents moments du processus d'évaporation

Dans la campagne d'expériences, le profil d'interface est obtenu toutes les secondes grâce au dispositif d'acquisition dont la fréquence est de 1 hertz. L'angle de contact au cours du temps est représenté sur la figure [2.24\(a\)](#) tandis que l'évolution de l'angle de contact le long du rayon de la zone sèche est représenté sur la figure [2.24\(b\)](#).

La figure [2.24](#) nous montre qu'après l'apparition de la ligne triple et donc la création de la zone sèche, l'angle de contact est relativement stable et est de 4 à 5 degrés pour le HFE_{7100} . Au début de l'apparition de la ligne triple, celui-ci semble légèrement plus faible. La naissance de la ligne triple est un phénomène instable dont l'étude nécessite une fréquence d'acquisition supérieure.

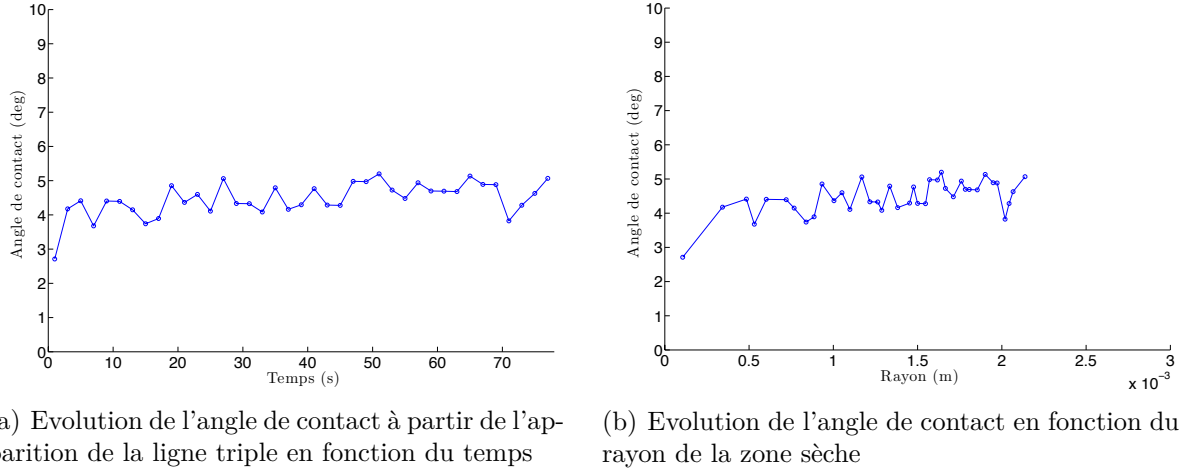


FIGURE 2.24 – Evolution de l'angle de contact au cours du processus d'évaporation

Observons maintenant l'évolution de la position de la ligne triple au cours du temps ainsi que la vitesse de celle-ci (figure 2.25).

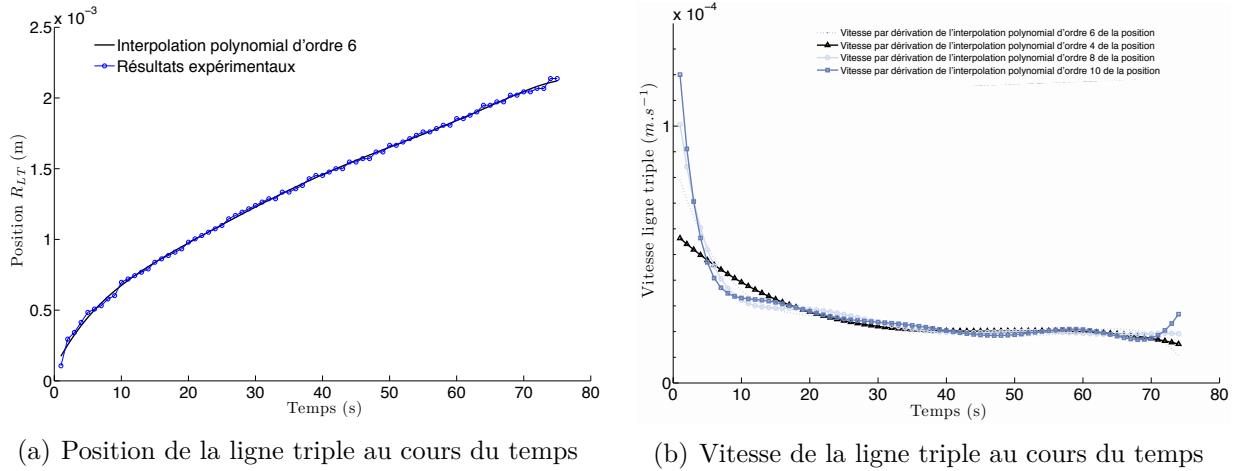


FIGURE 2.25 – Position et vitesse de ligne triple au cours du temps

La courbe 2.25(a) montre l'évolution de la position de la ligne triple au cours du temps. La courbe bleue constitue les points expérimentaux. La courbe noire est une interpolation polynomiale d'ordre 6 des points expérimentaux. La ligne triple évolue rapidement dans les quelques secondes qui suivent son apparition puis, à partir d'une dizaine de secondes, son évolution devient quasiment linéaire jusqu'à la fin du processus. Un ordre important d'interpolation est nécessaire afin de retranscrire la forte évolution de la position de la ligne triple au début de son apparition.

Le graphe 2.25(b) représente l'évolution de la vitesse de la ligne. Cette vitesse est obtenue en dérivant l'interpolation polynomiale. Les différentes courbes représentent les différents profils obtenus selon l'ordre de l'interpolation polynomiale (4 à 10).

On voit que dans les premiers instants qui suivent la naissance de la ligne triple, la vitesse de celle-ci décroît considérablement pour se stabiliser à une valeur moyenne située autour de $2.5 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$ au bout de 10 secondes. La vitesse initiale de la ligne triple est proche de $2 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$, ce qui est quasiment 10 fois supérieur à la vitesse moyenne.

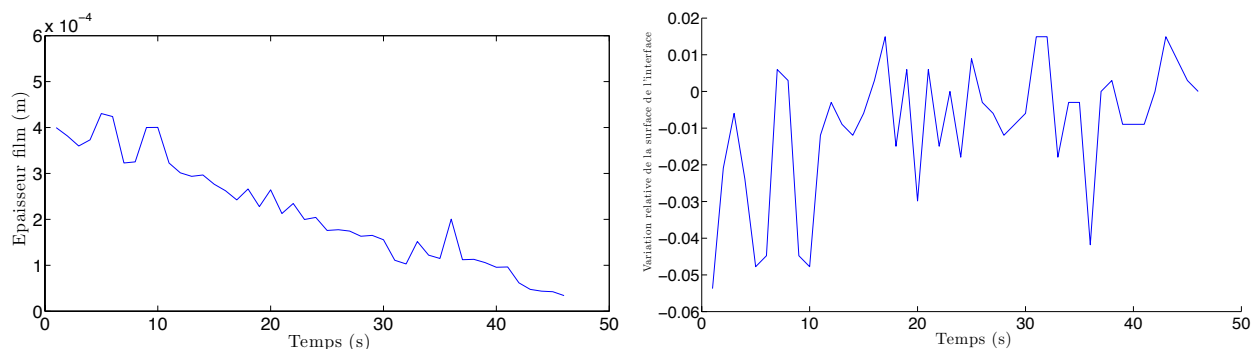
2.5 Applications

Dans cette partie, on propose quelques applications de la méthode permettant de donner des ordres de grandeurs et de répondre à certaines questions du problème d'évaporation de film axisymétrique décrit dans le chapitre 1. Les conditions expérimentales sont les mêmes que celles décrites au début de ce chapitre, à savoir une quantité initiale de $25 \mu\text{l}$ de HFE_{7100} déversée dans le puits d'évaporation sur un substrat en verre.

2.5.1 Calcul de l'épaisseur de film avant l'apparition de la ligne triple

Lors de l'intégration de l'équation 2.11 permettant d'obtenir le profil de l'interface, on voit que le profil obtenu dépend d'une constante z_0 . Dans l'algorithme, cette constante est toujours prise comme étant la hauteur spatiale de la paroi supérieure du substrat. Ceci est vrai à partir du moment où la ligne triple est apparue au cours du processus d'évaporation. Cependant, avant l'apparition de la zone sèche, il y a une épaisseur de film qui décroît pendant le processus d'évaporation au centre du puits. Cette épaisseur étant inconnue avant la ligne triple, cette épaisseur est calculée comme étant l'épaisseur permettant d'égaliser la masse géométrique, définie dans l'expérience de la pesée dynamique, avec la masse mesurée. L'évolution de cette épaisseur au cours du temps est représentée sur la figure 2.26(a). Même si cette courbe est très bruitée, la décroissance de ce film a plutôt une tendance linéaire.

Cette tendance linéaire permet de calculer la vitesse de descente de l'interface avant l'apparition de la ligne triple. A partir de cette courbe, on mesure une vitesse de $8 \mu\text{m.s}^{-1}$.



(a) Epaisseur de film au centre du puits avant l'apparition de la zone sèche (b) Variation relative de la surface de l'interface avant l'apparition de la zone sèche

FIGURE 2.26 – film avant l'apparition de la ligne triple

2.5.2 Forme de l'interface avant l'apparition de la ligne triple

La figure 2.26(b) montre les variations relatives de la surface de l'interface liquide-gaz avant l'apparition de la ligne triple. La courbe représentée est : $\frac{Surface - Surface_{finale avant ligne triple}}{Surface_{finale avant ligne triple}}$. Cette courbe également très bruitée permet de donner une estimation sur la précision de la mesure sur la surface de part son bruit. Ainsi, la précision sur la mesure de la surface serait de 5 %.

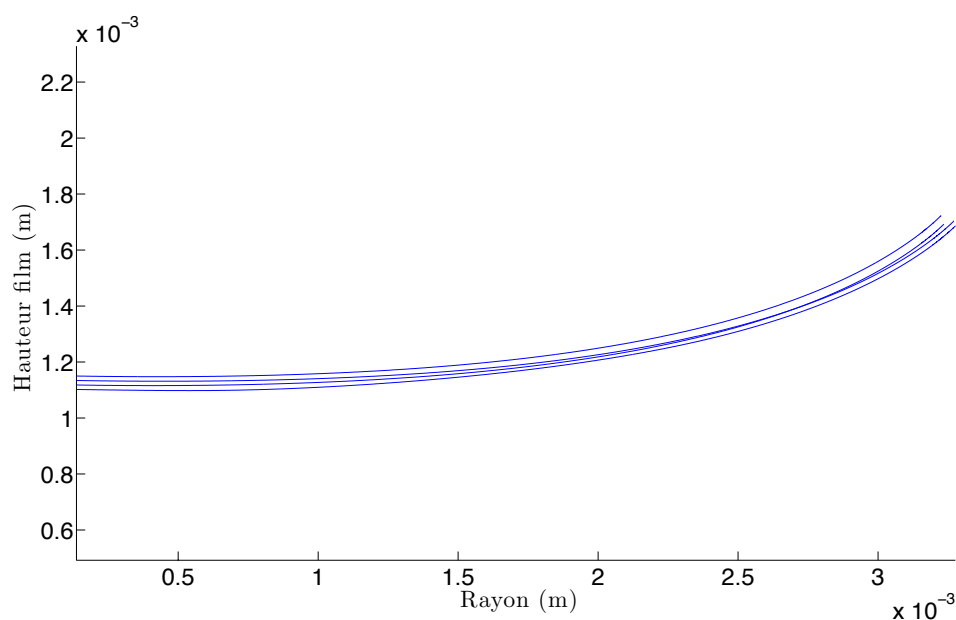


FIGURE 2.27 – Interface gaz-liquide à différents moments du processus d'évaporation avant l'apparition de la ligne triple, $\Delta t = 4s$

La figure 2.27 montre la forme de l'interface reconstituée pour différentes hauteurs de films. Le pas de temps entre les différentes hauteurs est de 4 s. On voit que pour un volume initial de fluide de $25\mu l$, la concavité varie très peu. Les courbures moyennes des différents profils sont les mêmes à 10 % près. La valeur moyenne du rayon de courbure est de $4,2mm$.

2.6 Conclusion

Ce chapitre a présenté les fondements de la méthode optique de reconstruction d'interface. Cette méthode s'applique sur des ménisques ou des gouttes pour des fluides très mouillants. La méthode repose sur deux points clefs : comment mesurer précisément une intensité lumineuse relative grâce à un appareil photo numérique et comment les variations d'intensité lumineuse d'une nappe laser sont corrélées à la forme de l'interface gaz liquide.

La technique permet la mesure de la position de la ligne triple ainsi que la mesure de l'angle de contact pour des angles de contact allant de 2° à 35° . La précision de la méthode a été validée sur un ménisque en verre. Le profil de l'interface est précis à $1.10^{-5}m$ à proximité de la ligne triple. L'angle de contact est précis à $0,5^\circ$ près et la position de la ligne triple à $25\mu m$ près.

Chapitre 3

Etude de la ligne triple

Sommaire

3.1	Introduction	74
3.1.1	Etat de l'art sur la ligne de contact	74
3.1.2	Synthèse bibliographique	75
3.2	Dispositif expérimental	75
3.2.1	Comparaison de l'algorithme de traitement d'image avec la méthode d'inversion optique	78
3.2.2	Incertitude de mesures	78
3.3	Influence du substrat sur la vitesse de la ligne triple	79
3.3.1	Influence de la conductivité thermique du substrat sur la dynamique d'évaporation	79
3.3.2	Influence de l'épaisseur du substrat sur la dynamique d'évaporation	81
3.4	Influence de la ligne triple sur l'évaporation	83
3.4.1	Substrat en verre	84
3.4.2	Substrat teinté et opaque	89
3.4.3	Substrat mince	93
3.4.4	Détermination d'un débit massique linéique d'évaporation variable au niveau de la ligne triple : condition limite numérique.	94
3.5	Conclusion	95

L'aspect singulier de la ligne de contact a été évoqué dans le chapitre 1. Les travaux théoriques sur ce sujet sont nombreux, cependant, deux grandes familles existent : les travaux sur la dynamique de la ligne de contact et les travaux sur le transfert de masse et de chaleur à la ligne de contact. Les modèles de ligne de contact dynamique avec transfert de masse sont actuellement au coeur de la communauté scientifique. Cependant les validations expérimentales sont rares.

L'objet de ce chapitre est de mettre en lumière la contribution de la ligne triple au processus d'évaporation et d'étudier quelques paramètres pouvant influencer sur celle-ci. Les expériences réalisées nous permettent d'obtenir les flux linéiques singuliers, propre à la ligne de contact, ce qui s'avère être une condition limite pertinente pour la modélisation numérique du phénomène.

3.1 Introduction

3.1.1 Etat de l'art sur la ligne de contact

Afin d'améliorer la miniaturisation des systèmes thermiques et d'augmenter leurs capacités à dissiper la chaleur, les écoulements diphasiques avec évaporation sont de plus en plus utilisés. Ceci du au fait de leur capacité à extraire une quantité importante d'énergie à température constante. Ces systèmes sont caractérisés par la présence d'une ligne en contact avec trois phases, liquide, solide et gaz, au voisinage de laquelle se trouve un film mince où se concentre de forts flux de chaleur engendrant un taux d'évaporation important. La compréhension du phénomène de changement de phase au niveau de cette ligne de contact s'impose dans une logique d'optimisation de système de refroidissement [Höhm and Stephan \(2002\)](#).

Les interactions thermodynamiques et hydrodynamiques au voisinage de la ligne de contact sont un sujet d'actualité, on peut citer : [Rednikov et al. \(2009\)](#), [Ajaev \(2005\)](#), [Colinet et al. \(2007\)](#), [Mathieu \(2003\)](#). Cependant, pendant longtemps, seul l'aspect hydrodynamique ou thermodynamique était étudié.

D'un point de vue thermique, le concept de film mince a été introduit par [Renk and Wayner Jr \(1979b\)](#) puis suivi par [Moosman and Homsy \(1980\)](#), [Stephan and Busse \(1992\)](#), [DasGupta et al. \(1993\)](#), [Morris \(2001\)](#), [Ajaev and Homsy \(2001\)](#). Cela consiste à supposer qu'il existe un film de liquide adsorbé de quelques molécules d'épaisseur faisant la jonction entre la partie macroscopique du liquide et la paroi (figure 1.5), par l'intermédiaire d'une zone à faible résistance thermique appelée la *micro-région*. La dimension de cette zone est de l'ordre de quelques μm . Les modèles théoriques prédisent que le flux local d'évaporation au niveau de la *micro-région* sont maximaux.

D'un point de vue dynamique, de nombreuses études fondées sur la mécanique des milieux continus classiques ont été faites [Dussan V and Davis \(1974\)](#), [Dussan V \(1976\)](#), [Hocking \(1977\)](#), [Proudman and Asadullah \(1988\)](#). Celles-ci visent à lier vitesse de ligne triple et angle de contact. D'autres approches, visant à mieux prendre en compte les aspects microscopiques sont mis en avant [Gouin and Gavriluk \(1999\)](#), [Hadjiconstantinou \(1999\)](#), [Pomeau \(2002\)](#). Finalement, beaucoup de ces modèles peuvent être interprétés comme une variante des modèles de [Dussan V and Davis \(1974\)](#) où les phénomènes microscopiques se résument à un angle de contact microscopique et une longueur de glissement.

Dans le but de relier les aspects hydrodynamiques et les aspects thermodynamiques, [Mathieu \(2003\)](#) a couplé les travaux thermodynamiques de [Stephan and Hammer \(1994\)](#) avec les travaux hydrodynamiques de [Dussan et al. \(1991\)](#). Il aboutit à un modèle synthétique adapté à un large éventail de configurations. Cependant, ce modèle théorique introduit une longueur de glissement dont la valeur, déterminée à l'aide d'expériences, remet en question

sa pertinence. De plus, un grand nombre d'hypothèses et de simplifications sur lesquelles repose ce modèle sont à valider expérimentalement.

Expérimentalement, l'évaporation en *micro-région* a également été étudiée par [Renk and Wayner Jr \(1979a\)](#), [Panchamgam et al. \(2008\)](#). Le profil de la *micro-région* est déterminé par interférométrie ce qui leur a permis de valider les prédictions des modèles théoriques associés. Expérimentalement, la mesure des flux de chaleur et des taux d'évaporation de la *micro-région* soulève quelques difficultés à cause de l'aspect microscopique de cette zone. Toutefois, des techniques basées sur la dépendance en température des cristaux liquides (TLC : *Thermochromic Liquid Crystals*) ont été mises au point [Höhm and Stephan \(2002\)](#). Celles-ci permettent la mesure de la température de façon non intrusive au voisinage de la ligne de contact. La résolution spatiale de cette technique est de $1\ \mu\text{m}$, taille caractéristique de la *micro-région*. Cependant cette technique est limitée à des variations en température de $0.2\ ^\circ\text{C}$.

La thermographie infra-rouge s'avère être un outil très intéressant pour la mesure du profil de température d'un solide à proximité de la *micro-région*. Cet outil a été utilisé par [Ibrahim et al. \(2010\)](#) afin de mesurer le profil de température en proche ligne triple d'un solide. Ce profil est alors utilisé pour le calcul du flux de chaleur de la *micro-région*. Dans cette expérience, il est montré que le flux de chaleur est 5 à 6 fois plus important au niveau de la *micro-région* qu'au niveau de la région macroscopique.

3.1.2 Synthèse bibliographique

Les modèles de ligne triple couplant dynamique et changement de phase commencent à voir le jour, toutefois, ceux-ci se basent souvent sur des hypothèses fortes et des paramètres que seule l'expérience peut fournir. Les dimensions microscopiques de la zone d'étude compliquent la tâche de l'expérimentateur et nécessitent du matériel de haute technologie.

Nous proposons, dans le chapitre qui suit, d'essayer de mettre en évidence expérimentalement la contribution de la ligne triple, donc de la *micro-région*, sur le processus d'évaporation à l'aide d'une approche très simplifiée dans le cadre du problème axisymétrique de film en évaporation décrit dans le chapitre 1.

Après l'étude de quelques paramètres relatifs au solide intervenant au niveau de la ligne de contact tels que l'épaisseur et la conductivité du substrat, nous montrons, à l'aide d'une approche discutable, pourquoi et comment le problème étudié nous permet de quantifier un débit linéique d'évaporation que l'on peut associer à la *micro-région*.

3.2 Dispositif expérimental

Afin d'étudier le comportement de la ligne triple sur le problème axisymétrique de film en évaporation présenté dans le chapitre 1 sur différents substrats dont certains sont opaques, l'expérience suivante a été mise en place.

L'expérience consiste à filmer en vue de dessus le processus d'évaporation à l'aide d'une caméra visible (figure 3.1). Une fois créée, la zone sèche apparaît clairement comme un disque dont le rayon croît au cours du temps. La ligne triple est donc le périmètre de ce disque. Le rayon de ce disque au cours du temps représente ainsi la position de la ligne triple au cours du temps. Un algorithme de traitement d'image décrit dans l'annexe .1 permet de détecter le rayon de ce disque afin de traiter automatiquement les séquences d'images.

Le puits d'évaporation est une *paille* de 6 mm de diamètre et de 1,5 mm de profondeur. Celui-ci est déposé sur un substrat (Aluminium, Cuivre, Verre, Znse) dont la conductivité thermique dépend du type de matériaux. Le fluide utilisé est du HFE_{7100} dont le volume est 25 ou 50 μL . L'expérience est éclairée par dessus à l'aide d'un écran Flox monochromatique. La déflexion des rayons lumineux étant différente selon que l'on soit sur le substrat ou sur le film, la tache sèche est clairement mise en évidence. Une caméra en noir et blanc de résolution 1280x1024 permet l'acquisition. Parallèlement, une balance METTLER Toledo XS 205 Dual Range dont la précision est de 10^{-4} g quantifie en temps réel la masse de fluide restante.

La figure 3.1 illustre le protocole expérimental de cette expérience.

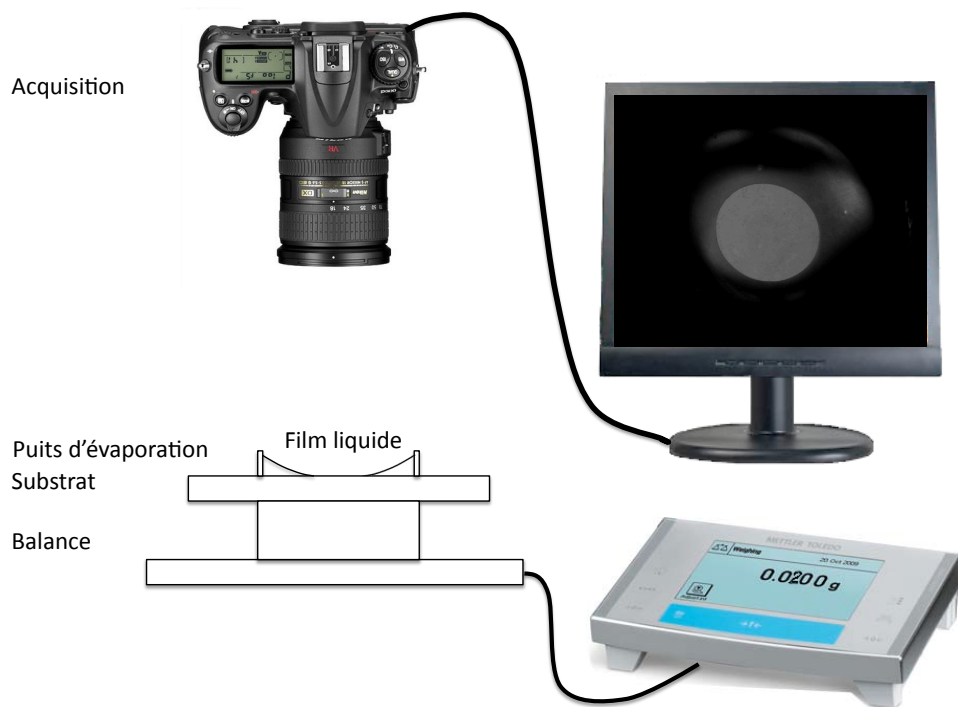


FIGURE 3.1 – Dispositif expérimental pour l'étude de l'influence du substrat sur le processus d'évaporation.

Au cours de l'évaporation, l'interface descend jusqu'à l'apparition de la zone sèche. C'est le périmètre de ce cercle que nous suivons au cours du temps ainsi que la masse associée.

3.2.1 Comparaison de l'algorithme de traitement d'image avec la méthode d'inversion optique

Dans cette partie nous allons comparer les résultats de l'évolution de la ligne triple obtenus avec la méthode optique de reconstruction d'interface décrite dans le chapitre 2 avec ceux obtenus à partir des images visibles sur lesquelles on applique l'algorithme de traitement d'image. Les résultats ont été obtenus en utilisant du verre comme substrat. Dans cette comparaison, l'épaisseur du substrat est de 1 mm. Nous allons comparer les évolutions de la ligne triple obtenue pour un volume initial de 25 μL et de 50 μL . Chaque expérience a été faite deux fois sur les deux dispositifs expérimentaux. Quelque soit le dispositif expérimental, la température ambiante, ainsi que le substrat et son épaisseur sont les mêmes. Les conditions expérimentales sont identiques sur les deux bancs expérimentaux.

Le figure 3.2 illustre la position de la ligne triple au cours du temps déterminée avec la méthode optique ainsi qu'avec l'algorithme de traitement d'images. Sur cette figure, on a représenté les positions de ligne triple pour un volume initial de 25 μL et de 50 μL . Les courbes étant confondues pour un volume initial de 25 μL et de 50 μL , on déduit que le volume initial n'influence pas l'évolution de la position de la ligne triple une fois que la tâche sèche apparaît. De plus, on se rend compte que les masses de fluide correspondant à l'apparition de la tâche sèche sont sensiblement les mêmes quel que soit le volume. En effet, pour un puits d'évaporation avec un diamètre intérieur de 6 mm reposant sur un substrat en verre, la masse pour laquelle la ligne triple apparaît est de $0,0230 \pm 0,0005$ g.

La superposition satisfaisante des courbes obtenues à partir de l'algorithme de traitement d'images, avec celles obtenues à l'aide de la méthode optique d'inversion, nous permet de conclure que les deux méthodes donnent sensiblement les mêmes résultats et valident la fiabilité de l'algorithme de traitement d'image. De plus, cela montre que l'expérience est répétable et que l'évolution de la ligne triple est indépendante de la quantité initiale de fluide volatil pour ce substrat.

3.2.2 Incertitude de mesures

La précision sur la pesée est de 10^{-4} g.

La diamètre intérieur représente 850 pixels donc la précision spatiale est de 7 μm . Cependant l'algorithme de traitement d'image génère une erreur estimée à 4 pixels. Par conséquent, l'erreur spatiale est de 30 μm .

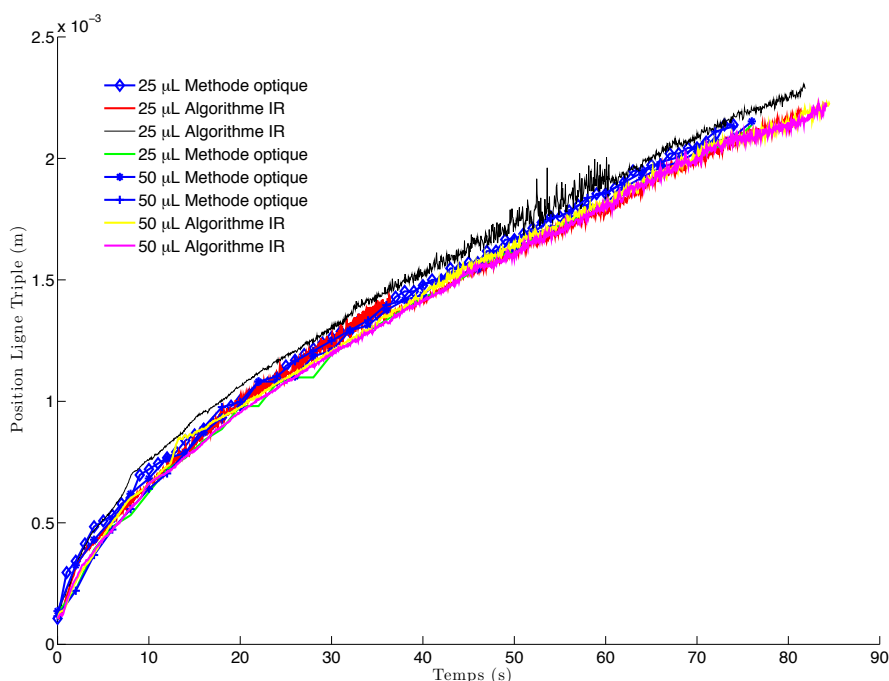


FIGURE 3.2 – Comparaison de l’algorithme de traitement d’image avec la méthode optique de reconstitution d’interface pour déterminer l’évolution de la ligne triple.

3.3 Influence du substrat sur la vitesse de la ligne triple

3.3.1 Influence de la conductivité thermique du substrat sur la dynamique d’évaporation

L’expérience reste fidèle au protocole à l’exception du substrat. Nous allons tenter de mettre en évidence l’influence de la nature du substrat sur l’évolution de la position de la ligne triple. Pour ce faire, nous allons utiliser des substrats polis dont les propriétés thermiques diffèrent. Les différents substrats sont le verre, l’aluminium et le ZnSe. Les propriétés thermiques de ces matériaux sont indiquées dans le tableau 3.1.

TABLE 3.1 – Propriétés physiques des différents substrats

	Conductivité λ	Masse volumique ρ	Capacité thermique C_p	ρC_p
Verre	$1,2 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$	$2,5 \text{ g.cm}^{-3}$	$720 \text{ J.kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	$1,8\text{e}6 \text{ J.m}^{-3}\text{K}^{-1}$
ZnSe	$18 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$	$5,27 \text{ g.cm}^{-3}$	$339 \text{ J.kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	$1,78\text{e}6 \text{ J.m}^{-3}\text{K}^{-1}$
Aluminium	$237 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$	$2,7 \text{ g.cm}^{-3}$	$897 \text{ J.kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	$2,4\text{e}6 \text{ J.m}^{-3}\text{K}^{-1}$

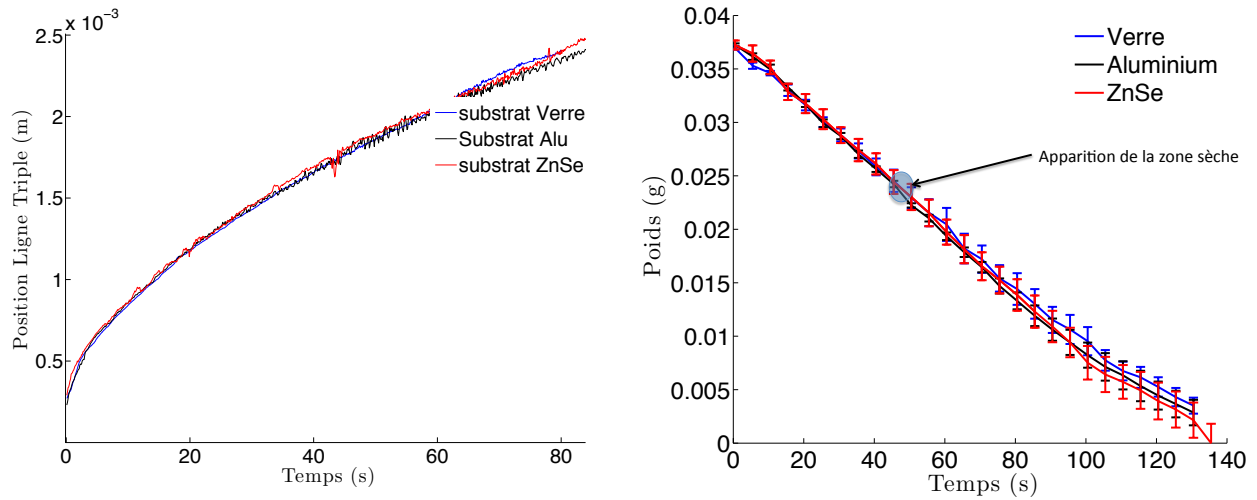
Les propriétés thermiques des différents substrats peuvent être interprétées de la façon suivante :

ρC_p : Quantité de chaleur stockée par le substrat par unité de volume pour un degré.

λ : Capacité du substrat à conduire la chaleur.

Ces trois substrats ont un volume similaire de 5cm de diamètre et 3mm d'épaisseur. Par conséquent, la quantité de chaleur stockée dans les trois substrats est sensiblement la même car la valeur du ρC_p est très similaire pour les trois matériaux. Ainsi, la propriété modifiée selon le matériau est la conductivité. En effet, celle-ci est multipliée par 15 entre le verre et le ZnSe et par 13 entre le ZnSe et l'aluminium.

Les courbes suivantes montrent l'évolution du rayon de la zone sèche 3.3(a) et de la masse 3.3(b) au cours du temps 3.3.



(a) Evolution de la position de la ligne triple pour les trois substrats

(b) Evolution de la masse de fluide pour les trois substrats

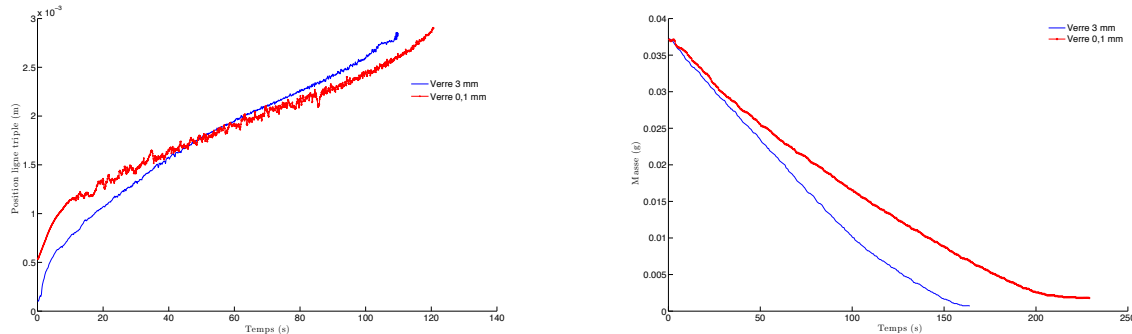
FIGURE 3.3 – Mise en évidence de la non influence de la conductivité sur le processus d'évaporation

A la vue de ces courbes, on déduit que la conductivité ne semble pas jouer un rôle prépondérant sur le processus d'évaporation. En effet, l'évolution de la position de la ligne triple 3.3(a), par conséquent la vitesse de celle-ci, est très semblable quelque soit le substrat alors qu'il y a un rapport 200 entre la conductivité du verre et celle de l'aluminium. La courbe 3.3(b) montrant l'évolution de la masse de fluide au cours du temps semble confirmer cette analyse. En effet, l'évolution de la masse au cours du temps a un profil similaire quelque soit le substrat. Celui-ci montre une tendance linéairement décroissante, que l'on peut attribuer à un

débit d'évaporation constant, jusqu'à une valeur située autour de $0,010 \text{ g}$ où le profil perd de sa linéarité. On constate que les temps d'évaporation sont sensiblement les mêmes. On peut donc raisonnablement conclure, qu'avec un substrat possédant les dimensions énoncées au début de la section, la conductivité thermique ne joue pas un rôle prépondérant et que la dynamique d'évaporation est assez lente pour ne pas être limitée par la conductivité du substrat.

3.3.2 Influence de l'épaisseur du substrat sur la dynamique d'évaporation

Précédemment, on a vu que la conductivité thermique du substrat ne semblait pas influencer sur la dynamique du processus d'évaporation pour des conductivités supérieures à $1 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Il est également intéressant de tester l'influence de la quantité de chaleur que peut fournir le substrat. Pour ce faire, nous allons faire varier l'épaisseur de celui-ci dans le cadre du verre. Nous allons tester des substrats de 3 mm et $100 \mu\text{m}$ d'épaisseur. Les propriétés thermiques sont données dans la table 3.1.



(a) Evolution de la position de la ligne triple pour différentes épaisseurs de substrat de verre

(b) Evolution de la masse de fluide pour différentes épaisseurs de substrat de verre

FIGURE 3.4 – Influence de l'épaisseur du substrat de verre sur la dynamique d'évaporation

La courbe 3.4(a) met en évidence deux différences notables sur l'évolution de la position de la ligne triple au cours du processus d'évaporation. La première constatation est que la zone sèche apparaît avec un rayon considérablement plus grand de l'ordre de $0,5 \text{ mm}$ alors que dans le cas des substrats plus épais la zone sèche se crée avec un rayon initial deux fois plus petit, environ $0,25 \text{ mm}$, lorsque celle-ci prend une forme circulaire. Cela se répercute légèrement sur la masse d'apparition de la zone sèche avec une masse instantanée lors de l'apparition de la zone sèche de $0,020 \text{ g}$ dans le cas du substrat mince alors que pour les substrat épais, la masse d'apparition de la ligne triple se situe à $0,023 \text{ g}$.

Ensuite, après la naissance de la zone sèche, dans les deux cas, substrats épais et mince, le rayon de ligne triple croît dans un premier temps, rapidement de façon similaire puis ralentit sa croissance avec une évolution plus lente pour le cas du substrat mince. Les vitesses de ligne triple, illustrées par la figure 3.5 confortent cette observation. Ces vitesses sont obtenues par différenciation de l'interpolation polynomiale de l'évolution du rayon de ligne triple au cours du temps. A la création de la zone sèche, les vitesses de ligne triple sont importantes puis décroissent de façon considérable avec un comportement similaire quelle que soit l'épaisseur du substrat vers une valeur relativement constante obtenue au bout de 15 secondes après la rupture du film. La rupture du film est un phénomène discontinu libérant instantanément l'énergie de tension de surface de la surface de la zone sèche au moment de sa création.

Une fois que la rupture est stabilisée, les vitesses de ligne triple prennent des valeurs constantes pour le reste du processus d'évaporation avec des valeurs inférieures de 25 pour cent pour le substrat mince. Cela se traduit par une durée d'évaporation plus importante pour une même quantité de fluide.

La courbe de l'évolution de la masse au cours du temps 3.4(b) confirme l'influence notable de l'épaisseur du substrat sur le processus d'évaporation. En effet, cette courbe montre que le temps du processus d'évaporation est supérieur de 25 pour cent dans le cas du substrat mince pour une même quantité de matière évaporée. Ce qui se traduit par un débit d'évaporation moyen, pente de la courbe de masse en fonction du temps, inférieur dans le cas du substrat mince.

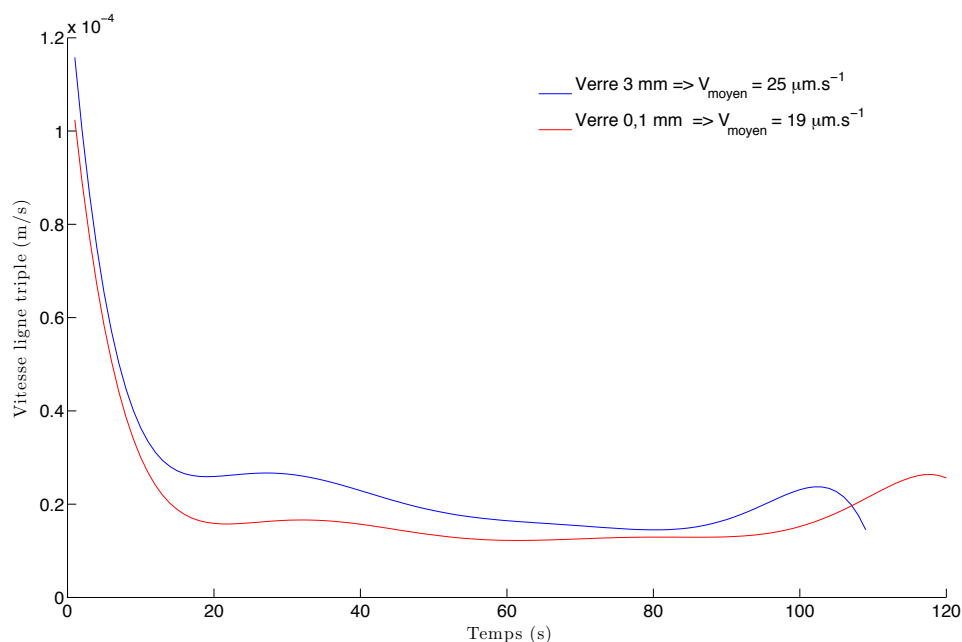


FIGURE 3.5 – Vitesse de ligne triple pour deux épaisseurs de substrats de verre

Ainsi, il semblerait que l'épaisseur du substrat peut jouer un rôle clairement limitant dans le processus d'évaporation, dans la mesure où celui-ci ne contient pas assez d'énergie pour la quantité de fluide à évaporer.

L'énergie fournie par le substrat est $V_{substrat}\rho C_p\Delta T$, ΔT étant la différence de température moyenne dans le temps et dans l'espace du substrat. L'énergie nécessaire à l'évaporation, $V_{HFE7100}L_v$, est indépendante du substrat. Par conséquent, si $V_{substrat}$ est petit, ΔT est important. Cela a pour effet d'abaisser la température en contact avec le liquide limitant ainsi l'évaporation.

3.4 Influence de la ligne triple sur l'évaporation

Dans cette partie nous travaillons toujours sur le problème axisymétrique de film en évaporation décrit dans le chapitre 1. Comme cela a été évoqué, un des intérêts de ce problème est que le périmètre de la ligne triple augmente quand la surface d'échange liquide-gaz et liquide-substrat diminue et qu'il reproduit la création d'une ligne triple. Cela permet de mettre en lumière les transferts relatifs aux phénomènes de ligne triple même si les transferts relatifs aux phénomènes d'interface sont prépondérants.

Afin d'essayer de mettre en évidence l'influence de la ligne triple sur le processus d'évaporation, nous allons raisonner par l'absurde. Pour ce faire, nous allons dans un premier temps, supposer que le débit d'évaporation ne dépend que de la surface de l'interface liquide-gaz. Cela revient à supposer que les phénomènes physiques singuliers de la ligne de contact n'influencent pas le processus d'évaporation. Nous considérons que la ligne triple située au niveau de la paroi du puits d'évaporation n'a aucun effet sur le processus. En effet, l'énergie mise en jeu pour évaporer la quantité de fluide est de 4,5 joules, or l'aspect capacitif du puits d'évaporation, défini comme étant le produit de la masse du puits et de sa capacité calorifique, n'est que de $10^{-3}J.K^{-1}$. De plus, nous négligeons l'apport de chaleur provenant du substrat par conduction au niveau de la paroi du puits d'évaporation. On rappelle que la conductivité de la paroi du puits est de $0,3W.m^{-1}.K^{-1}$ et que son épaisseur est inférieure à $50\mu m$.

On suppose que le débit d'évaporation est proportionnel à la surface de l'interface. Par conséquent, l'intégrale de ce débit au cours du temps, équivalent à la masse au cours du temps, est proportionnelle à l'intégrale de la surface au cours du temps (équation 3.1).

Il nous a semblé plus judicieux de travailler sur la masse plutôt que sur le débit massique car la masse est directement la valeur que l'on mesure. Travailler sur le débit massique nous impose de dériver le signal expérimental de l'évolution de la masse en fonction du temps. Pour obtenir cette grandeur, il aurait fallu interpoler le signal expérimental de façon polynomiale ou par transformée de Fourier ou autres méthodes. Bien souvent le profil obtenu dépend du type d'interpolation choisi. Afin de perdre un minimum d'information par rapport aux valeurs mesurées, nous allons mettre en évidence l'influence des transferts au niveau de la ligne triple à partir des courbes de masses.

$$\frac{dM(t)}{dt} = \alpha S(t) \Leftrightarrow M_{theo}(t) = \int_{t_0}^t \frac{dM(u)}{du} + M(t_0) = \alpha \int_{t_0}^t S(u)du + M(t_0) \quad (3.1)$$

L'équation 3.1 nous permet de calculer une masse théorique appelée par la suite M_{theo} qui correspondrait à la masse du fluide au cours du temps dans la mesure où la ligne triple n'aurait aucune influence sur l'évaporation du fluide. Le temps t_0 correspond à l'instant initial de l'expérience. Le calcul de cette masse théorique nécessite la connaissance de la surface de l'interface.

Cette étude est présentée pour différents substrats :

- Substrat en verre pour lequel la surface de l'interface est déduite de la méthode optique de reconstruction d'interface décrite dans le chapitre 2.
- Substrat teinté et opaque pour lequel la surface de l'interface est considérée proportionnelle à $R_0^2 - R_{lt}^2$ où R_0 est le rayon du puits d'évaporation et R_{lt} celui de la zone sèche.

3.4.1 Substrat en verre

Pour des substrats en verre, afin de calculer la masse théorique définie par l'équation 3.1, nous allons utiliser la méthode d'inversion optique, décrite dans le chapitre 2, nous permettant de déterminer la surface de l'interface liquide-gaz à partir de la forme du profil de l'interface. La surface est calculée de façon axisymétrique par l'intégrale suivante :

$$S = \int_0^{2\pi} \int_{R_0}^{R_{max}} dS r d\theta dr \quad (3.2)$$

L'algorithme d'inversion nous donne un ensemble de points représentant la valeur du rayon et la hauteur de film associée. Ainsi de manière discrète, le calcul de l'interface se fait par la formule suivante 3.3 :

$$S = 2\pi \sum_{i=0}^N dS_i \quad (3.3)$$

avec,

$$dS_i = r_i \sqrt{dz_i^2 + dr_i^2} \quad (3.4)$$

Ainsi, nous connaissons la surface au cours du temps. Afin d'appliquer la formule 3.1, il nous faut déterminer le coefficient de proportionnalité α de cette formule. Pour ce faire, nous faisons une interpolation linéaire de la courbe de masse mesurée avant l'apparition de la ligne triple. En effet, avant l'apparition de la ligne triple, la ligne triple centrale n'existe pas du fait de l'inexistence de zone sèche au centre du puits d'évaporation. Par conséquent, la formule 3.1 semble parfaitement appropriée dans ce cas là. L'interpolation linéaire nous donne le coefficient directeur de la courbe de masse mesurée avant l'apparition de la ligne triple (coefficients directeurs des droites de la figure 3.6). Ce coefficient directeur est égal à αS_0 . La connaissance de la surface avant la ligne triple nous permet de déterminer α . Les

variations de la surface avant l'apparition de la ligne triple sont négligeables.

Une fois que la ligne triple apparaît et donne naissance à une zone sèche, la surface de l'interface, calculée à l'aide de la méthode optique de reconstruction d'interface, décroît. Cette décroissance varie de façon quasiment quadratique par rapport au rayon de la zone sèche. La décroissance de la surface de l'interface devrait se traduire par une variation de la pente sur la courbe de l'évolution de masse si les effets relatifs à la ligne n'influent pas sur le processus d'évaporation.

Désormais, α étant connu, nous pouvons appliquer la formule 3.1 à partir des temps correspondant à l'apparition de la ligne triple. Nous pouvons, dès lors, comparer l'évolution de la masse théorique calculée avec l'équation 3.1, considérant que l'influence de la ligne triple sur le processus d'évaporation dans cette configuration est négligeable, avec la masse mesurée expérimentalement avec la balance METLER Toledo décrite dans le protocole expérimental de la section 3.2. Cette comparaison est l'objet du graphe 3.6. Sur ce graphe, la masse mesurée est représentée par la courbe en trait plein. Le courbe représentée par le symbole " * " désigne la masse théorique calculée avec l'équation 3.1 à partir de l'apparition de la ligne triple. La courbe en pointillé est l'interpolation linéaire de la masse mesurée avant l'apparition de la ligne triple dont le coefficient directeur vaut αS_0 .

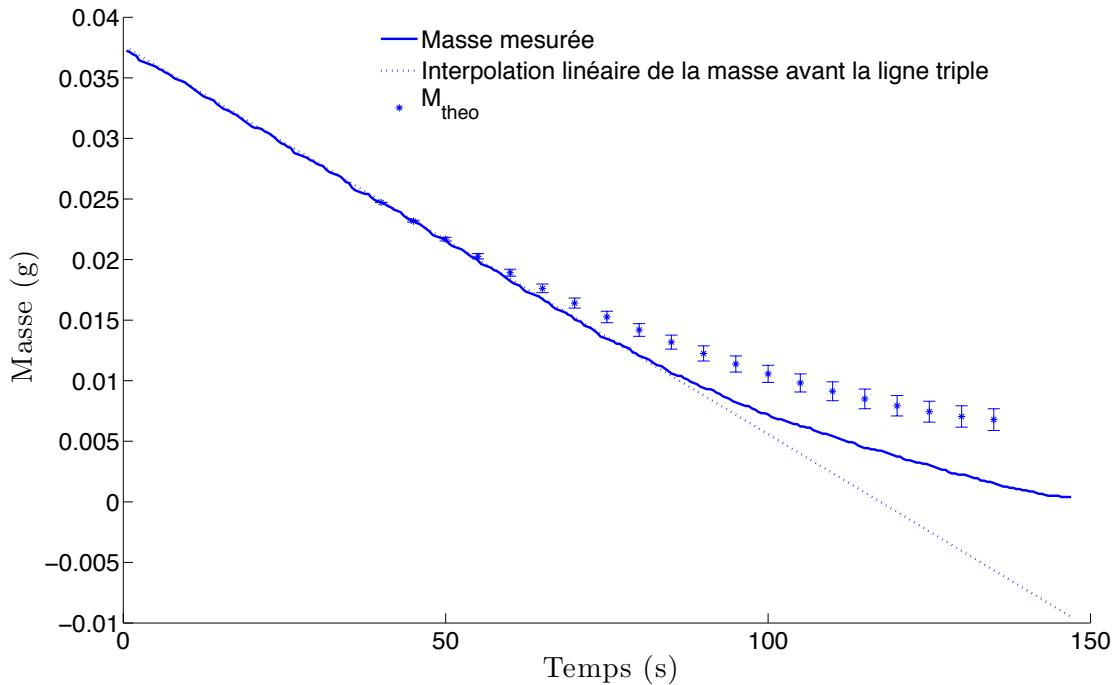


FIGURE 3.6 – Comparaison masse théorique masse mesurée sans prise en compte d'un flux massique linéique au niveau de la ligne triple

Ce graphe montre une différence croissante entre la courbe de masse théorique M_{theo} et

la courbe de masse mesurée. Le fait d'obtenir une différence montre que les hypothèses supposant une influence nulle des effets de ligne triple sur le processus d'évaporation et un débit d'évaporation uniquement proportionnel à la surface de l'interface sont fausses, car dans le cas contraire, les courbes devraient se superposer. De plus, le fait que cette différence augmente peut convenablement s'expliquer par l'influence croissante des effets de ligne triple dûs à l'augmentation du périmètre de la zone sèche.

Désormais, nous allons quantifier la différence qu'il y a entre les deux courbes. Pour ce faire, nous allons créer une nouvelle fonction résultant de la différence entre les points constituant la masse théorique M_{theo} et les points constituant la masse mesurée. Cette fonction appelée ΔM , représente l'évolution de la perte de masse due aux effets de ligne triple. Cette fonction est représentée sur le graphe 3.7 (axe de gauche) en fonction de la position de la ligne triple le long du rayon du puits d'évaporation. La dérivée temporelle de cette fonction représente l'évolution du débit de masse dû aux effets de ligne triple intégrés sur tout le périmètre de celle-ci. On définit le débit massique linéique comme étant le débit de masse dû aux effets de ligne triple divisé par la longueur de la ligne de contact.

Pour le calculer, on divise le débit de masse dû aux effets de ligne triple par le périmètre de celle-ci.

$$\dot{m}_{lin}(t) = \frac{\frac{d\Delta M(t)}{dt}}{2\pi R_{LT}(t)} \quad (3.5)$$

La courbe d'évolution du débit linéique dû aux effets de ligne triple \dot{m}_{lin} est représentée sur la figure 3.7 (axe de droite) en fonction du rayon de ligne triple. L'inconvénient de cette définition est que le débit linéique dépend de la dérivée de la différence entre la masse mesurée et la masse théorique ($\frac{\partial \Delta M}{\partial t}$). Or pour créer ΔM , une interpolation polynomiale de la masse mesurée a été faite. Par conséquent, le profil de $\dot{m}_{lin}(t)$ est directement lié à l'ordre de l'interpolation polynomiale utilisé. Toutefois, la moyenne temporelle de cette fonction va être quantifiée (équation 3.6) pour tenter d'évaluer un débit linéique d'évaporation.

A présent, nous allons reprendre l'équation 3.1. Dans cette équation, nous allons ajouter un terme dépendant du périmètre de la ligne triple sur le débit massique d'évaporation. Ce terme est le débit massique linéique moyen $\overline{\dot{m}_{lin}}$, calculer par l'équation 3.6 en prenant la valeur numérique moyenne des termes calculés à partir de l'équation 3.5, multipliée par le périmètre de la ligne triple R_{LT} évoluant au cours du temps.

$$\overline{\dot{m}_{lin}} = \frac{\sum_{i=1}^N \dot{m}[i]_{lin}}{N} = 5.10^{-3} (g.s^{-1}.m^{-1}) \quad (3.6)$$

Ainsi, l'équation 3.1 devient :

$$\frac{dM(t)}{dt} = \alpha S(t) + \overline{\dot{m}_{lin}} 2\pi R_{LT}(t) \Leftrightarrow \quad (3.7)$$

$$M_{theo}(t) = \int_{t_0}^t \frac{dM(u)}{du} + M(t_0) = \alpha \int_{t_0}^t S(u) du + 2\pi \overline{\dot{m}_{lin}} \int_{t_0}^t R_{LT}(u) du + M(t_0) \quad (3.8)$$

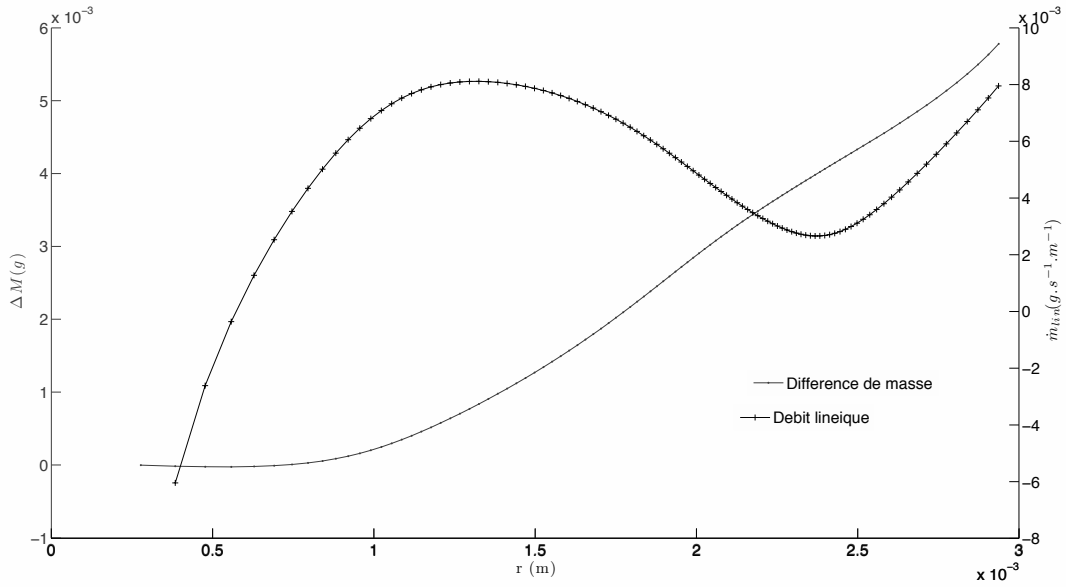


FIGURE 3.7 – Différence entre la masse théorique et la masse mesurée et débit massique linéique d'évaporation au niveau de la ligne triple en fonction du rayon de ligne triple

L'évolution de cette courbe de masse théorique au cours du temps $M_{theo}(t)$ est représentée sur le graphe 3.8 avec la courbe de masse mesurée.

Ainsi cette courbe se superpose beaucoup mieux à la masse mesurée expérimentalement. Dans l'équation 3.7 on a pris une valeur moyenne de débit linéique d'évaporation considérant de la sorte que les effets de la ligne triple sur le débit d'évaporation ne dépendaient que du périmètre de celle-ci. C'est une première approximation, qui permet de gagner un ordre de précision sur le calcul de la masse théorique. En effet, la courbe 3.9 représente la différence entre la masse théorique et la masse mesurée en fonction de la position de la ligne triple avant la prise en compte des effets de ligne triple ΔM_{old} (axe de droite) et après ΔM_{new} (axe de gauche). L'erreur maximale commise sur la masse théorique était comprise entre 10^{-3} et 10^{-2} (g) sans l'influence du débit linéique. Avec son influence, celle ci est comprise entre 10^{-4} et 10^{-3} (g).

A partir de cette quantification de l'effet local de la ligne triple, nous pouvons quantifier la proportion du flux d'évaporation propre à la ligne triple par rapport au flux d'évaporation total. Cette proportion est définie par l'expression suivante nommée α_{lt} :

$$\alpha_{lt}(t) = \frac{2\pi\bar{\dot{m}}_{lin}R_{LT}(t)}{\alpha S(t) + 2\pi\bar{\dot{m}}_{lin}R_{LT}(t)} \quad (3.9)$$

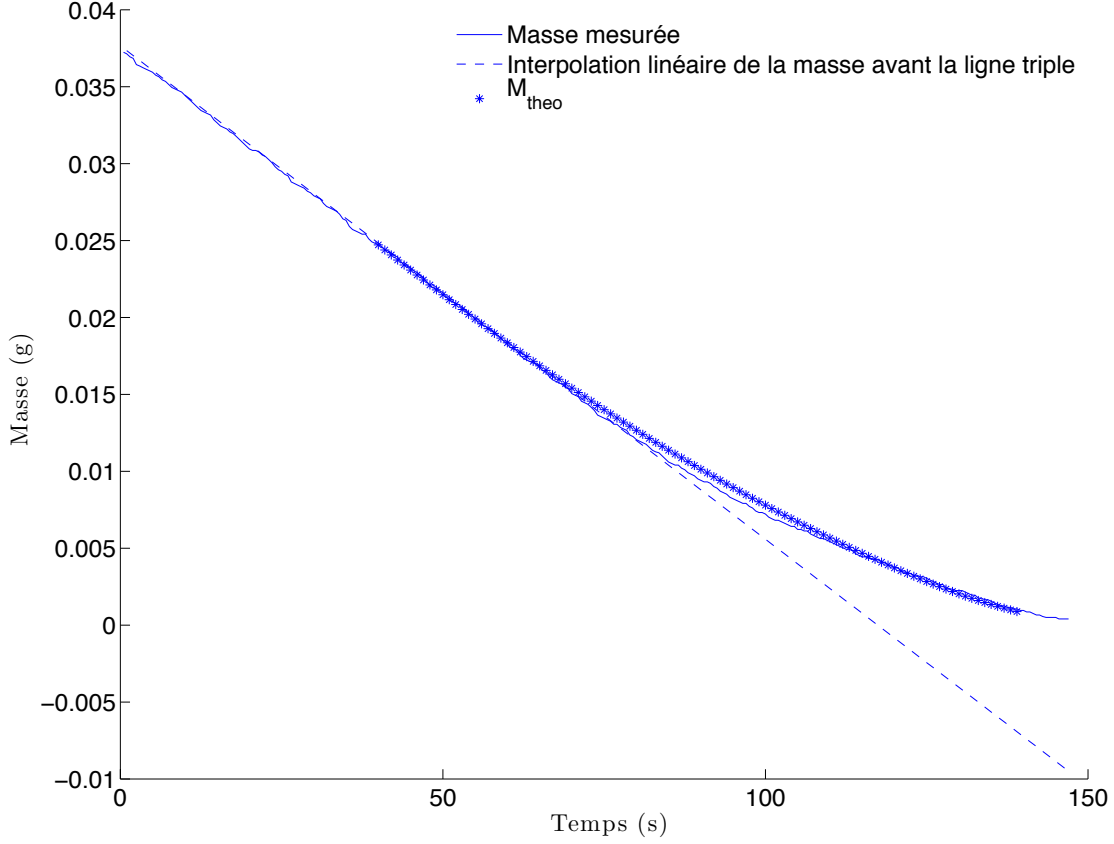


FIGURE 3.8 – Comparaison masse théorique masse mesurée avec prise en compte d'un flux massique linéique au niveau de la ligne triple

La proportion du flux d'évaporation au niveau de l'interface α_{int} s'exprime par :

$$\alpha_{int}(t) = \frac{\alpha S(t)}{\alpha S(t) + 2\pi \bar{m}_{lin} R_{LT}(t)} \quad (3.10)$$

Le graphe 3.10 représente l'évolution respective de ces deux proportions en fonction de la position de la ligne triple au cours du processus d'évaporation. La courbe en bleu symbolisée par "+" représente la proportion de flux correspondant aux effets de ligne triple, celle en noir symbolisée par "°" correspond à la proportion de flux relative à l'interface.

A la vue de ce graphe, on voit que dès que le rayon de la ligne triple atteint la valeur de 1 mm, ce qui correspond à un périmètre de 6,28 mm, le flux d'évaporation relatif à la ligne triple correspond déjà à plus de 10 pour cent du flux total.

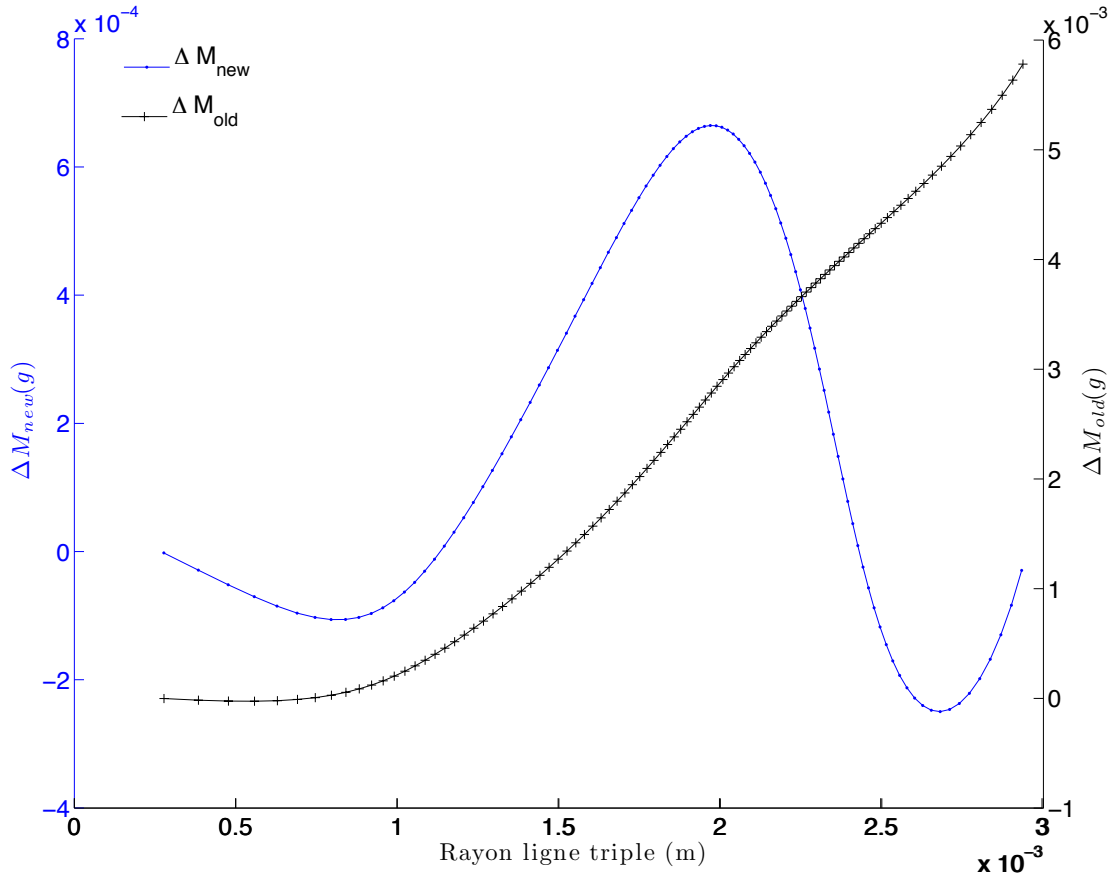


FIGURE 3.9 – Différence entre la masse théorique et la masse mesurée avant et après la prise en compte des effets de ligne triple

3.4.2 Substrat teinté et opaque

Précédemment, nous avons étudié l'effet de ligne triple sur les transferts de masse au cours du processus d'évaporation dans le cadre d'un substrat en verre. Dans cette partie, nous allons présenter les mêmes résultats que dans la section précédente mais avec un substrat en ZnSe et en Aluminium. Nous avons vu dans la section 3.3 que le processus d'évaporation ne semblait pas dépendre de la conductivité du substrat pour des conductivités supérieures à $1 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. En effet, avec des substrats de 3 mm d'épaisseur, on a vu qu'une conductivité deux cents fois plus grande, (celle de l'aluminium), n'avait pas d'influence sur la cinétique d'évaporation du problème étudié décrit dans le chapitre 1. Par conséquent l'effet de ligne triple sur le processus d'évaporation mis en évidence dans la section précédente devrait se retrouver sur ces substrats. Ainsi, comme dans la partie précédente, nous allons calculer la masse théorique définie par l'équation 3.1 négligeant, de la sorte, les effets de ligne triple. Puis nous allons tenir compte des effets de ligne triple, en considérant que ceux-ci sont proportionnels au périmètre de celle-ci 3.7 et constater que cette masse théorique est très

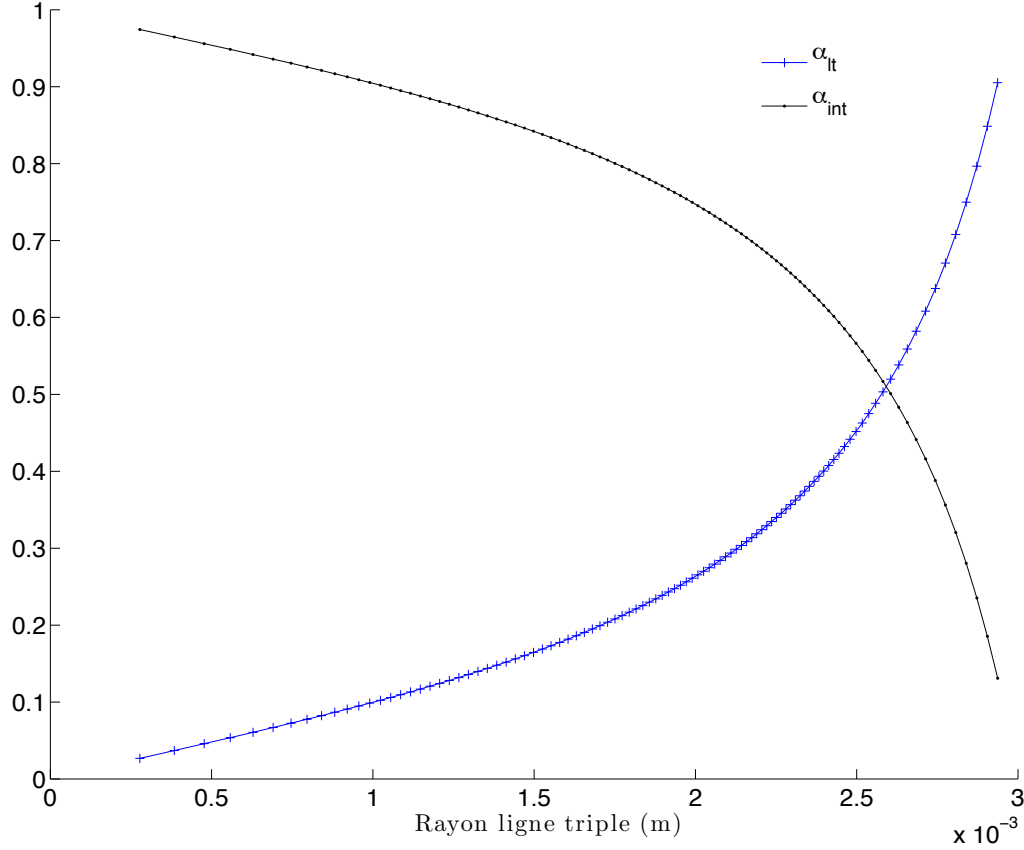


FIGURE 3.10 – Evolution des différentes proportions de flux en fonction du rayon de ligne triple

proche de la masse expérimentale. Le débit linéique moyen $\overline{m_{lin}}$ de l'équation 3.7 sera dans un premier temps le même que pour le substrat en verre puis recalculer, si nécessaire, de la même façon que pour le substrat en verre.

Afin de calculer les différentes masses théoriques M_{theo} des équations 3.1 et 3.7, nous avons besoin de connaître la surface de l'interface. Or pour les substrats en aluminium et en ZnSe, nous avons uniquement l'évolution du rayon de la zone sèche au cours du temps. Nous allons donc tenter de calculer la surface à partir de la connaissance du rayon. Pour ce faire, nous allons utiliser la méthode optique d'inversion afin de trouver l'équation liant la surface de l'interface au rayon.

Le courbe 3.11 représente la surface en fonction de $R_0^2 - R_{lt}^2$ pour le substrat en verre. Une approximation linéaire de cette courbe est très correcte, ce qui permet de mettre en évidence la dépendance linéaire de la surface de l'interface avec le rayon de la zone sèche au carré. Nous allons supposer que cette dépendance linéaire en fonction du rayon de ligne triple au carré reste valable pour les substrat en verre et en aluminium. Ces substrats sont, comme le

verre, très polis.

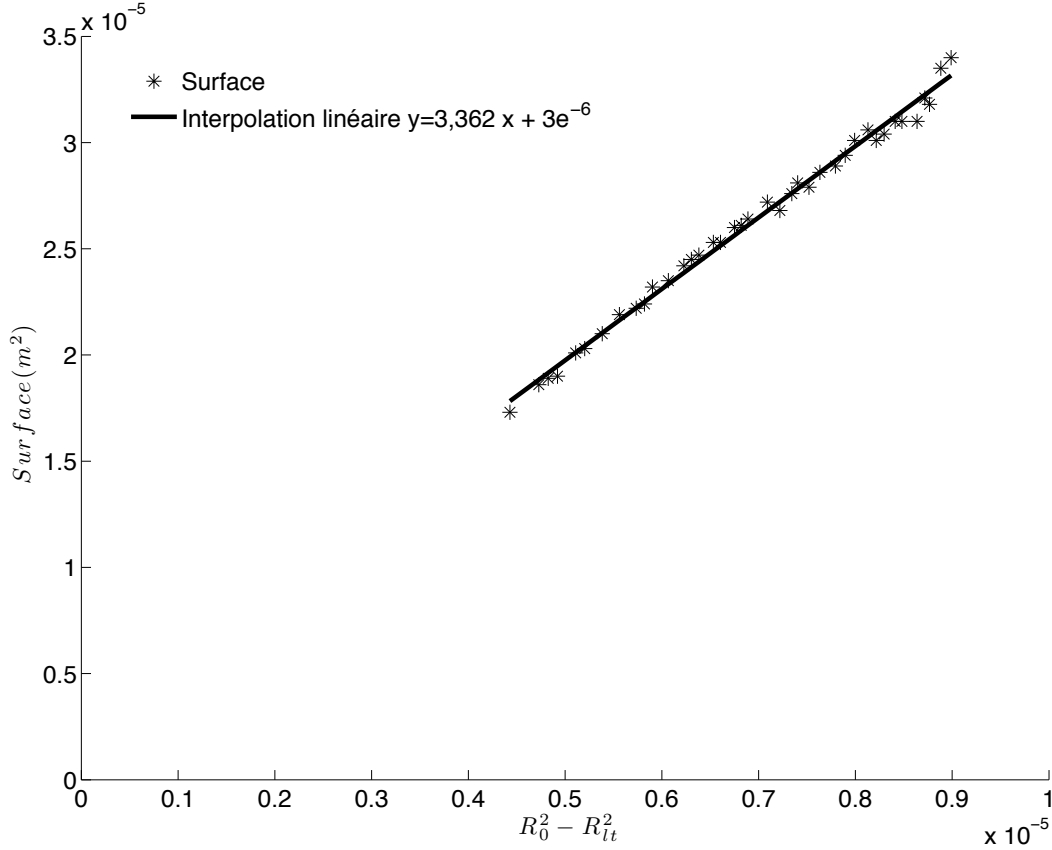


FIGURE 3.11 – Surface de l'interface en fonction du rayon de ligne triple élevé au carré

Ainsi, dans l'hypothèse où la surface de l'interface ne dépend pas du substrat, la connaissance de la position de la ligne triple au cours du temps nous permet de calculer la surface de l'interface liquide-gaz au cours du temps via la dépendance linéaire, illustrée par la courbe 3.11, de celle-ci avec le rayon de ligne triple au carré.

Pour le verre, l'erreur relative faite par cette approximation linéaire sur le calcul de la surface de l'interface est inférieure à 3 %. De plus, la méthode d'inversion optique permet de calculer le profil de l'interface, donc la surface de celle-ci, pour des rayons de ligne triple maximum de 2 à 2,2 mm alors que le rayon interne du puits est de 3 mm. Ainsi pour les valeurs de rayon de ligne triple supérieures à 2,2 mm, il est difficile de connaître la précision de l'interpolation linéaire qui permet de déterminer la surface de l'interface à partir du rayon de la ligne triple. Toutefois, cette approximation linéaire est très correcte au moins jusqu'à des valeurs de rayons de ligne triple de 2 mm. Par conséquent, nous allons utiliser cette approximation pour la surface de l'interface dans le cadre des substrats en ZnSe et en Aluminium.

Dans l'équation 3.1 on a vu que la masse théorique se calculait comme l'intégrale du flux surfacique multiplié par la surface. On a également vu que le flux surfacique se calculait en prenant le rapport entre le coefficient directeur de l'interpolation linéaire de la courbe de pesée avant l'apparition de la ligne triple et la surface de l'interface avant l'apparition de la ligne triple. Par conséquent, à partir de l'approximation linéaire liant la surface de l'interface et le rayon de ligne triple au carré on montre facilement que l'équation 3.1 peut s'écrire de la forme suivante :

$$M_{theo}(t) = a \int_{t_0}^t \frac{(R_0^2 - R_{LT}^2(u))}{R_0^2} du + M(t_0) \quad (3.11)$$

Dans l'équation 3.11, a est le coefficient directeur de l'interpolation linéaire de la masse avant l'apparition de la ligne triple et R_0 est le rayon intérieur du puits d'évaporation. La figure 3.12(a) montre l'évolution de cette masse au cours du temps en comparaison avec la masse mesurée avec un substrat en ZnSe et en aluminium. La figure 3.12(b) représente les mêmes courbes mais en ayant pour abscisse le rayon de ligne triple.

De même que dans le cadre du verre, on remarque une différence croissante entre la courbe de masse mesurée et la courbe de masse théorique quel que soit le substrat. Avec ces notations, on peut de la même façon réécrire l'équation 3.7 qui consiste à exprimer l'évolution de la masse théorique dans le cas où l'on prend en compte un effet de ligne triple comme étant un débit d'évaporation linéique constant. Ainsi, dans le cas de l'approximation linéaire liant la surface de l'interface avec le rayon de ligne triple au carré, cette équation se réécrit de la forme suivante :

$$M_{theo}(t) = a \int_{t_0}^t \frac{(R_0^2 - R_{LT}^2(u))}{R_0^2} du + 2\pi \overline{m_{lin}} \int_{t_0}^t R_{LT}(u) du + M(t_0) \quad (3.12)$$

L'évolution de la masse théorique avec les effets de ligne triple au cours du temps pour le ZnSe et l'aluminium est représentée sur la courbe 3.12(a). La courbe 3.12(b) illustre ces évolutions en fonction de la position de la ligne triple. Le débit linéique $\overline{m_{lin}}$ est pris constant et égal au débit linéique trouvé dans le cadre du verre car on a vu que la conductivité ne semblait pas influencer, d'un point de vue global, sur le processus d'évaporation. Ainsi on constate qu'avec la même valeur de débit linéique permettant de prendre en compte les effets de ligne triple, les profils de masse se superposent convenablement pour un substrat en ZnSe et un substrat en aluminium. On rappelle qu'il y a un rapport 200 entre la conductivité du verre et celle de l'aluminium.

Ainsi, il semblerait qu'une première approximation visant à quantifier les effets locaux de ligne triple considérant ceux-ci comme un débit massique linéique constant intégré sur son périmètre donne des résultats satisfaisants. De plus la valeur de débit massique linéique de $5.10^{-3} \text{ g.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ semble être indépendante de la conductivité du substrat dans le cadre du

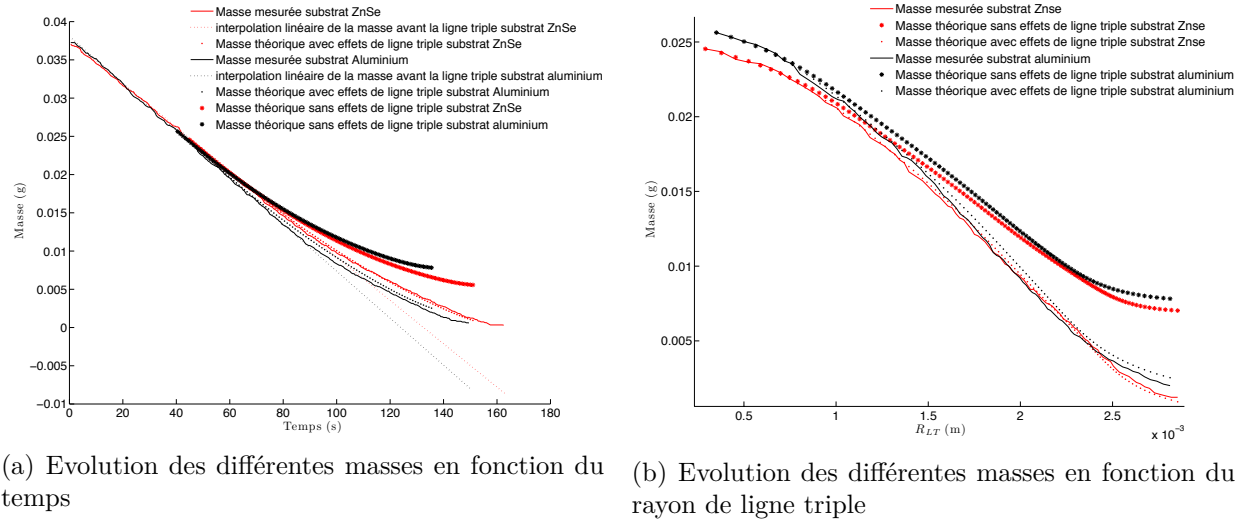


FIGURE 3.12 – Evolution des masses de fluide au cours du processus d'évaporation pour un substrat en aluminium et un substrat en ZnSe de 3 mm d'épaisseur

problème étudié, décrit dans la section 3.2. Cette valeur peut servir d'ordre de grandeur de référence dans le cadre de simulation numérique relative au problème étudié.

A partir du débit massique linéique, on peut calculer le flux de chaleur linéique correspondant grâce à la formule suivante :

$$\overline{\phi_{lin}} = \overline{\dot{m}_{lin}} L_v = 5.10^{-3} * 121 = 0,6 \text{ (} W.m^{-1} \text{)} \quad (3.13)$$

3.4.3 Substrat mince

Précédemment, on a vu que la conductivité du substrat ne semblait guère influencer sur le processus d'évaporation pour des substrats ayant une épaisseur de 3 mm. Cependant on a également vu dans la section 3.3.2 que l'épaisseur du substrat pouvait considérablement influencer sur la dynamique d'évaporation dans la mesure où celle-ci devient très faible.

Dans cette partie, on va calculer la masse théorique avec et sans les effets de ligne triple dans le cas d'un substrat en verre très mince d'une épaisseur de 100 μm . Cette masse est définie par l'équation 3.11 si l'on ne prend pas en compte les effets de ligne triple et par l'équation 3.12 si l'on en tient compte. On a vu que quel que soit la conductivité du substrat, avec un substrat d'une épaisseur de 3 mm, la modélisation des effets de ligne triple comme étant l'intégrale sur son périmètre d'un débit massique linéique d'évaporation constant, donnait des résultats satisfaisants sur la courbe de masse. La valeur de ce débit linéique égal à $5.10^{-3} g.m^{-1}.s^{-1}$ quelle que soit la conductivité était satisfaisante pour une épaisseur de substrat de 3 mm. Les courbes 3.13(a) et 3.13(b) représentent respectivement la masse théorique avec et sans prise en compte des effets de ligne triple en fonction du temps et en fonction du rayon de ligne triple dans le cadre d'un substrat d'une épaisseur de 100 μm et de 3 mm.

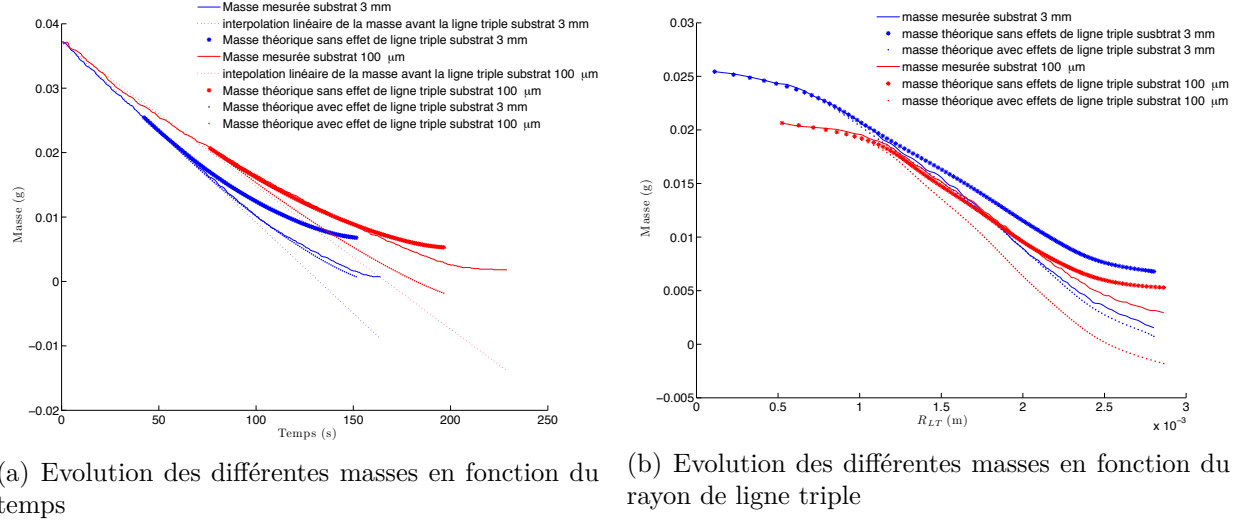


FIGURE 3.13 – Evolution des masses de fluide au cours du processus d'évaporation pour un substrat de 3 mm et un substrat de 100 μm

Dans les courbes de la figure 3.13, on constate que la différence entre la masse théorique sans prise en compte des effets de ligne triple et la masse mesurée lorsque le substrat a une épaisseur de 100 μm est beaucoup plus négligeable que dans le cas où l'épaisseur du substrat est de 3 mm. Pour le calcul de la masse théorique avec prise en compte des effets de ligne triple, la valeur $5.10^{-3} \text{ g.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ a été conservée pour le débit linéique. On constate que cette valeur donne des résultats insatisfaisants pour une épaisseur de substrat de 100 μm. En effet, une telle valeur sur le débit de masse linéique engendre une masse théorique largement inférieure à la masse mesurée. Cela implique qu'avec une telle épaisseur de substrat, la valeur prise pour le débit massique linéique est largement surestimée. De plus, on voit que la courbe de masse théorique qui ne prend pas en compte les effets de ligne triple est très proche de la courbe de masse mesurée. Par conséquent, on peut aisément supposer que les effets de ligne triple sont bien moindres dans ce cas de figure.

3.4.4 Détermination d'un débit massique linéique d'évaporation variable au niveau de la ligne triple : condition limite numérique.

Dans cette partie, nous allons établir une loi empirique permettant de calculer le débit massique linéique relatif aux effets de ligne triple en fonction du temps à partir de la connaissance de la courbe de masse expérimentale au cours du temps et de la position de la ligne triple au cours du temps.

Pour ce faire, nous allons reprendre l'équation 3.5. Cette équation est la définition du débit linéique. Dans celle-ci, le terme $\frac{d\Delta M(t)}{dt}$ apparaît. Ce terme n'est autre que la dérivée tempo-

relle de la différence entre la masse théorique et la masse mesurée. Or on a vu que la masse théorique pouvait convenablement s'exprimer en fonction du rayon de ligne triple. Ceci nous amène à l'égalité suivante :

$$\frac{d\Delta M(t)}{dt} = \frac{\partial a \int_{t_0}^t \frac{(R_0^2 - R_{LT}^2(u))}{R_0^2} du}{\partial t} - \frac{\partial M_{exp}}{\partial t} = a \frac{(R_0^2 - R_{LT}^2(t))}{R_0^2} - \frac{\partial M_{exp}}{\partial t} \quad (3.14)$$

Cette équation est valable à partir de l'apparition de la ligne triple. Dans cette équation, M_{exp} est la masse mesurée au cours du temps et a est le coefficient directeur de l'interpolation linéaire de la courbe de masse avant l'apparition de la ligne triple. En combinant cette équation avec l'équation 3.5, on arrive à l'expression suivante :

$$\dot{m}_{lin}(t) = \frac{a \frac{(R_0^2 - R_{LT}^2(t))}{R_0^2} - \frac{\partial M_{exp}}{\partial t}}{2\pi R_{LT}} = \frac{-a R_{LT}(t)}{2\pi R_0^2} + \frac{-\frac{\partial M_{exp}}{\partial t} + a}{2\pi R_{LT}(t)} \quad (3.15)$$

Ainsi, cette équation permet de calculer directement le débit massique linéique d'évaporation au niveau de la ligne triple à partir de la connaissance de la courbe de masse et de la position de la ligne triple au cours du temps.

Cette équation pourra être facilement implémentée en tant que condition limite au niveau de la ligne de contact lors de simulations numériques. Le paramètre a peut être déterminé expérimentalement ou numériquement. Il correspond au débit d'évaporation total avant l'apparition de la ligne triple.

3.5 Conclusion

Les résultats obtenus dans cette partie sont très discutables car ceux-ci reposent sur les hypothèses suivantes :

- La ligne triple relative à la paroi du puits d'évaporation n'influe pas sur le processus d'évaporation.
- La densité de flux d'évaporation est constante sur l'interface liquide-gaz.
- La surface de l'interface dépend du rayon de la zone sèche au carré quelle que soit la nature du substrat étudié.

Toutefois, sous réserve des hypothèses précédentes, cette expérience a permis de mettre en évidence l'effet de la ligne triple sur le processus d'évaporation. Un débit linéique de $5.10^{-3} g.s^{-1}.m^{-1}$ correspondant à un flux de chaleur échangé de $0,6 W.m^{-1}$ a été quantifié dans le cadre d'évaporation naturelle sur un substrat d'une épaisseur de $3 mm$. A partir d'un rayon de ligne triple de $1 mm$, l'apport relatif à la ligne triple sur le processus d'évaporation est déjà de 10% sur l'évaporation totale. Cet apport est croissant avec l'augmentation de la zone sèche dans le cadre du problème axisymétrique de film en évaporation.

L'épaisseur du substrat peut avoir un rôle limitant en dessous d'une certaine épaisseur, en

effet dans le cadre du verre la cinétique d'évaporation est plus lente avec un substrat de $100\ \mu m$ qu'avec un substrat de $3\ mm$. De plus l'apport des effets de ligne triple sur le processus d'évaporation semble beaucoup moins marqué. Ceci tend à valider la première hypothèse. Pour un substrat d'une épaisseur suffisante, il semblerait que la conductivité n'ait pas un rôle majeur sur la cinétique d'évaporation pour des conductivités supérieures à $1\ W.m^{-1}K^{-1}$. La conductivité a été multipliée par 200 pour une même capacité thermique ($V\rho C_p$) sans que les différences soient significatives.

Cette expérience de pesée dynamique repose sur des hypothèses fortes qui méritent une investigation plus poussée. Toutefois les résultats obtenus dans ce chapitre ont conforté notre intérêt à l'égard de cette expérience dans laquelle on assiste à la création d'une ligne triple dont la taille croît au cours du temps tandis que le volume de fluide décroît.

Méthode de suivi d'interface 3D

Chapitre 4

Développement d'une méthode de suivi d'interface 3D à maillage mobile

Sommaire

4.1	Contextes scientifiques	101
4.2	Etat de l'art	101
4.2.1	Méthodes Eulériennes : capture d'interface	102
4.2.2	Méthodes Lagrangiennes : suivi d'interface	104
4.2.3	Synthèse bibliographique	109
4.3	Méthode de suivi d'interface 3D	110
4.3.1	Principe de la méthode	110
4.3.2	Définition des grandeurs discrètes	113
4.3.3	Localisation de l'interface dans le maillage	116
4.3.4	Définition topologique de la nouvelle surface	120
4.3.5	Projection de la nouvelle topologie sur l'ancienne interface : Création de la nouvelle surface	124
4.4	Architecture algorithmique de la méthode	128
4.4.1	Structure parallélisable	128
4.4.2	Architecture algorithmique : optimisation du temps d'exécution . .	128
4.5	Exemple : évaporation d'un film axisymétrique	130
4.6	Conclusion	132

Nous avons vu dans le chapitre 1 que les phénomènes intervenant dans le problème étudié étaient fortement dépendants des interfaces. Dans le chapitre 2, nous avons mis au point une technique permettant de reconstituer précisément la forme des interfaces dans le cadre de films ou de gouttes en évaporation. Afin de mettre en oeuvre un arsenal d'outils performants pour l'étude de ces problèmes, d'un point de vue numérique, il est impératif de développer

une méthode de suivi d'interface tridimensionnelle décrivant la géométrie de l'interface de façon précise. Une description fine de l'interface permet d'imposer des conditions limites expérimentales (forme de l'interface, angle de contact, vitesse de la ligne triple, courbure...) et de voir l'impact de ces conditions limites sur les champs scalaires et vectoriels des variables du problème. Dans une autre démarche, une description fine de l'interface, d'un point de vue numérique, offre la possibilité de tester des modèles de conditions limites théoriques (modèles de ligne triple, relations de sauts...) et de comparer l'impact mésoscopique de ces modèles sur la forme et la dynamique de l'interface numérique avec les formes obtenues expérimentalement.

4.1 Contextes scientifiques

Ces développements s'inscrivent dans les thématiques de recherche du laboratoire IUSTI sur les problèmes relatifs à la physique du changement de phase au sein d'une interface gaz-liquide et la dynamique des lignes triples. Afin de tenir compte de la physique particulière de ces interfaces, nous avons développé une méthode de suivi d'interface infiniment fine. L'interface est toujours constituée par les lignes de maillage du domaine d'étude. Les singularités physiques opérant au niveau des interfaces sont alors considérées comme des conditions limites du maillage.

Ce chapitre présente les fondements et les algorithmes de la méthode développée.

4.2 Etat de l'art

Un des enjeux actuels de la simulation numérique consiste à modéliser des phénomènes physiques, mettant en jeu des fluides dans plusieurs états de leurs phases ou des fluides de nature différentes. Dans ces cas de figure, nous rencontrons des problèmes dans lesquels des singularités physiques à la frontière entre les espèces apparaissent. De nombreux modèles physiques ont été développés dans le but de comprendre la physique des interfaces. De ces modèles, il ressort des conditions dites "relations de sauts" que l'on cherche à appliquer comme conditions limites au domaine de calcul dans le cadre de simulations numériques multi phasiques. Ces conditions sont à appliquer au niveau des frontières entre les différentes espèces. Ces frontières sont appelées interfaces. Une des grandes difficultés de la simulation numérique consiste au suivi des ces interfaces au cours de la modélisation du phénomène physique. Ces interfaces sont en mouvement, peuvent avoir des formes à forte courbure locale et peuvent interagir entre elles. Ainsi, il faut étudier différents critères pour évaluer la qualité d'une méthode de suivi d'interface. Parmi ces critères, il y a la capacité de la méthode à décrire correctement l'interface dans un champ de vitesse. En effet, la physique des interfaces, (relations de sauts), dépend de phénomènes physiques d'échelles très diverses qui peuvent amener à des singularités spatiales. Il est important, malgré ces singularités, que la méthode soit robuste et soit capable de faire converger le calcul vers une solution physique.

Dans le cadre du changement de phase liquide vapeur, les "relations de sauts" peuvent être très raides. A titre d'exemple, il y a un rapport supérieur à 1000 entre la masse volumique de l'eau et celle de sa vapeur. Or ces deux grandeurs interviennent directement dans les relations de sauts. En conséquence, il est important de pouvoir localiser précisément l'interface dans le domaine de calcul afin d'appliquer avec précision ce type de conditions limites.

Les relations de sauts dépendent fortement des propriétés algébriques telles que la courbure et la normale de l'interface. De ce fait, une méthode de suivi d'interface doit être capable de calculer précisément et rapidement ces propriétés.

En résumé, une bonne méthode de suivi d'interface doit concilier précision, robustesse et rapidité d'exécution. On notera qu'il est également important que la possibilité d'extension en 3D d'une méthode à partir de la 2D doit être formellement abordable. Dans la littérature,

il existe deux classes principales de méthodes de suivi d'interface :

- Les méthodes Eulériennes dans lesquelles l'interface est une fonction implicite du domaine, advectée par une équation de transport.
- Les méthodes dites Lagrangiennes qui décrivent l'interface par un maillage mobile, lui-même advecté par le champ de vitesse issu du calcul physique.

Les méthodes eulériennes sont en général les plus simples car elles évitent la gestion d'un maillage mobile, mais les discontinuités des champs sont représentées par une grandeur sur le maillage eulérien et la localisation de l'interface n'est pas très précise. Ces méthodes ont l'avantage de bien gérer les changements de topologie et tolèrent des interfaces à fortes courbures. Les méthodes Lagrangiennes sont, quant à elles, beaucoup plus difficiles à mettre en oeuvre du fait de la gestion du maillage de l'interface. Ainsi les changements de topologie et les interfaces à fortes courbures posent de sérieux problèmes de reconstruction d'interface surtout en trois dimensions. Cependant, ces méthodes sont naturellement plus précises car la discrétisation des champs de grandeurs physiques respecte la topologie de ces champs, c'est à dire que les lignes du maillage de l'interface suivent les discontinuités du champ physique. Il existe de nombreuses méthodes dites "hybrides" qui tentent de concilier les avantages des méthodes Eulériennes avec ceux des méthodes Lagrangiennes.

4.2.1 Méthodes Eulériennes : capture d'interface

Les méthodes eulériennes se basent sur les états des phases au sein du maillage eulérien pour en déduire la position de l'interface. Ainsi, le repérage est implicite et provient directement du calcul des équations de conservation. Une conséquence directe à cela est la gestion naturelle des phénomènes de coalescence et de rupture qui sont d'une complexité accrue dans le cadre des méthodes Lagrangiennes.

Les premières apparitions de telles méthodes remontent à 1965 avec les méthodes "Marker and Cells" nommées MAC [Harlow and Welch \(1965\)](#) (figure 4.1(a)) dans le cadre de l'étude des écoulements à surface libre.

Dans cette méthode, des marqueurs sont placés de façon volumique au sein d'une phase puis sont transportés par le champs de vitesse eulérien. La position de l'interface est alors déterminée grâce à la répartition spatiale de ces marqueurs. Cependant la position demeure imprécise car la présence de marqueurs dans les mailles proches de l'interface génère une diffusion numérique importante.

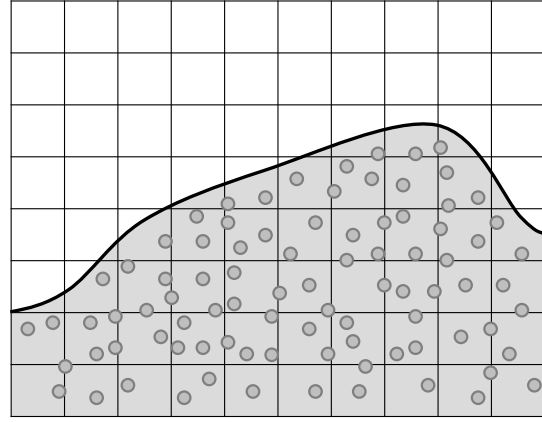


FIGURE 4.1 – (a) Mac méthode

En conséquence, les propriétés géométriques locales telle que la courbure, paramètre capital à la stabilité des tensions de surface, en sont grandement affectées. De plus, afin d'avoir une bonne représentation de l'écoulement, un grand nombre de marqueurs est nécessaire ce qui accroît considérablement le temps de calcul.

Les méthodes "Level Set" sont une variante de la méthode MAC inventées plus tard. Ces méthodes [Osher and Sethian \(1988\)](#); [Smereka and Osher \(1994\)](#); [Sussman and Smereka \(1997\)](#) consistent à remplacer les marqueurs par une fonction continue indiquant à chaque instant t et en chaque point du maillage eulérien x l'état de phase. Cette fonction est "la fonction Level Set" ou fonction distance signée $\Phi(x, t)$. Cette fonction est positive dans une phase et négative dans l'autre. L'interface est donc localisée par la ligne de niveau $\Phi(x) = 0$. Le mouvement de chaque phase est donc contenu dans le mouvement de la fonction distance qui est soumise à l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \Phi = 0 \quad (4.1)$$

Dans cette équation \vec{u} représente le champs de vitesse Eulérien. Grâce à cette méthode, on localise précisément la position de l'interface ce qui permet de calculer de façon convenable les caractéristiques géométriques locales telle que la courbure. Cependant ces méthodes ne conservent pas la masse, à cause des effets de diffusion numérique au cours de l'advection. Pour palier à ce problème, des étapes de redistanciation de la fonction distance [Jansen and Lahey \(2003\)](#) sont nécessaires sans totalement régler le problème en particulier dans le cadre des interfaces gaz/liquide où de fortes discontinuités de masse volumique interviennent, ce qui rend les équation de Navier-Stokes instable.

Des méthodes de raffinement local de type octree permettent de considérablement amoindrir ce défaut, voir [Min and Gibou \(2007\)](#).

Une autre variante, la méthode "Volume Of Fluid" VOF, introduit une fonction scalaire à la place de la fonction distance pour remplacer les marqueurs de la fonction MAC [Debar](#)

(1974); Chorin (1980); Hirt and Nichols (1980). Cette fonction correspond au volume de fluide contenu à l'intérieur d'une cellule. Cette fonction $C_k(x, t)$ vaut 1 dans la phase k et 0 dans les autres phases. Celle-ci est discontinue. Le déplacement de l'interface est contenu dans l'équation d'advection suivante :

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla C_k = 0 \quad (4.2)$$

Cette équation 4.2 est hyperbolique et conservative. Par conséquent, contrairement à la méthode Level Set, la conservation de la masse est respectée. Cependant, le transport d'une discontinuité s'avère problématique sur un domaine discret et fixe. On ne peut pas, d'un point de vue discret, transporter et conserver une discontinuité. En conséquence, on observe un étalement de la fonction C_k atténuant la discontinuité de celle-ci. Afin de remédier à ce problème, des algorithmes de reconstruction géométrique de l'interface ont été développés Diwakar et al. (2009); Pilliod et al. (2004). Ces algorithmes de reconstruction géométrique de l'interface sont confrontés à des difficultés topologiques pour l'extension en trois dimensions et la gestion de la coalescence et la fragmentation.

4.2.2 Méthodes Lagrangiennes : suivi d'interface

4.2.2.1 Méthodes "Front-tracking"

Dans les méthodes Lagrangiennes, on repère la position de l'interface pour en déduire les états de phase. On note les techniques de Front-Tracking. Cette méthode à été pensée très tôt dans l'histoire de la simulation numérique par Richtmyer and Morton (1967). Les premières implémentations de cette méthode remontent aux travaux de Glim et al. (1988).

Dans cette technique, l'interface est constituée d'un ensemble de marqueurs connectés entre eux par des segments de droite, par des polynômes d'ordre plus élevé ou des splines en deux dimensions (figure 4.2(a)). En trois dimensions, les marqueurs sont connectés entre eux en formant des triangles ou des éléments surfaciques d'ordre plus élevés. Le front de marqueurs constituant l'interface est advecté par interpolation du champs de vitesse du maillage eulerien. Les conditions de sauts sont de ce fait approximées à l'interface. L'avantage de ce type de méthode est la connaissance très précise de la position de l'interface ainsi qu'une très bonne représentation de la courbure de l'interface.

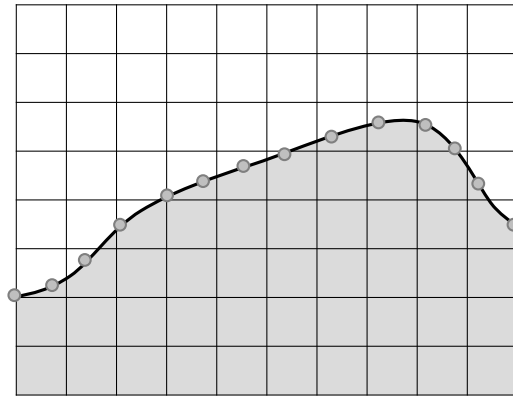


FIGURE 4.2 – (a) Front Tracking method

En conséquence, les forces de tensions superficielles peuvent être calculées directement. Il est également important de noter qu'avec ce type de méthode, l'échelle de phase peut être plus petite que la taille de maille eulerienne. C'est à dire que les éléments d'interface inférieurs à la taille du maillage eulerien ne sont pas lissés.

Un des inconvénients réside dans la façon dont l'interface interagit avec le maillage eulerien et vice versa. En effet la répartition des marqueurs devient de plus en plus inégale sur l'interface. En conséquence sur les zones où le nombre de marqueurs se raréfie, la description de l'interface perd en précision. Des algorithmes basés sur la courbure de l'interface ajoutent ou enlèvent des marqueurs afin de remédier à ce problème, cependant une erreur d'interpolation est engendrée. De plus, cela devient très compliqué lors du passage en trois dimensions.

Il est également important de noter que les phénomènes de coalescence et fragmentation des interfaces deviennent compliqués dans ce genre de méthode car contrairement aux méthodes euleriennes, ces phénomènes ne s'effectuent pas naturellement. Des algorithmes de connexion de maillages marchant avec plus ou moins de succès ont été envisagés en deux dimensions dès la début des travaux d'implémentation de ce type de méthode [Glim et al. \(1988\)](#).

La librairie FronTier téléchargeable sur le liens suivant :

<http://frontier.ams.sunysb.edu/download/download.php> est un robuste code de calcul des problèmes à interface reposant sur la méthode de front-tracking. Dans [Du et al. \(2006\)](#), les auteurs comparent la méthode Front-tracking de la librairie "FronTier" aux méthodes Level-Set et Volume of Fluid, ils mettent en lumière l'avantage des méthodes Lagrangiennes sur la précision du suivi d'interface tout en prouvant la faisabilité de ces méthodes en trois dimensions. L'article [Zeng and Zhang \(1998\)](#) explique l'implémentation numérique des algorithmes de cette librairie tout en mettant en valeur la bonne précision des résultats obtenus sur des cas tests classiques. Ces méthodes ont prouvé leurs efficacité dans de nombreux problèmes avec interfaces [J. Glimm X.-L. Li R. Menikoff D.H. Sharp \(1990\)](#); [Xu \(2002\)](#); [R.L. Holmes \(1995\)](#). Dans [Glimm et al. \(1999\)](#), les auteurs décrivent deux algorithmes robustes permettant de gérer les changements de topologie des interfaces en trois dimensions.

Cependant, la gestion de ces phénomènes nécessite la mise en place de critères complexes et coûteux en temps de calcul.

Dans [Unverdi and Tryggvason \(1992\)](#), les auteurs montrent de très bons résultats de reconnexion de maillage en 3 dimensions. Dans leur méthode, les équations de conservation sont résolues sur un maillage fixe et l'interface est suivie à l'aide d'un maillage mobile prévenant ainsi toute diffusion numérique. L'interpolation sur le maillage fixe des relations de sauts appliquées sur le maillage dynamique est faite grâce à la technique dite "Immersed Boundary Technique" introduite par [Peskin \(1977\)](#). Les changements de topologie de l'interface sont correctement traités grâce à la construction d'une fonction d'indication ayant une vision globale des éléments d'interface au voisinage d'un point. Cette fonction d'indication permet de correctement définir l'état de phase des points de la grille eulerienne en cas de reconnexion de maillage. Il est à noter que cette fonction d'indication semble dépendre d'un paramètre géométrique de lissage de l'interface.

Ces techniques ont été appliquées dans l'étude des collisions et de la diffusion thermique des gouttes [M. R. Nobari and Tryggvason \(1996\)](#); [Nas and Tryggvason \(1993\)](#); [Esmaeeli and Tryggvason \(1996\)](#).

Une reformulation des équations physiques de cet algorithme incluant le changement de phase est présentée dans [Juric and Tryggvason \(1998\)](#). L'extension en trois dimensions de cette formulation est proposée dans [Shin and Juric \(2002\)](#) et montre la capacité de leur code à simuler l'ébullition de film (figure 4.3(a)).

Dans cet article, la méthode de Front-Tracking a été simplifiée par l'élimination de la connectivité des éléments de l'interface car en cas de coalescence ou de fragmentation d'interface, la gestion de la connectivité de l'interface était compliquée, particulièrement en trois dimensions. La fonction d'indication, similaire à [Unverdi and Tryggvason \(1992\)](#), permettant de définir l'état de phase des points de la grille eulerienne ainsi que les propriétés physiques, est calculée à partir du nuage de points de l'interface à proximité du point considéré.

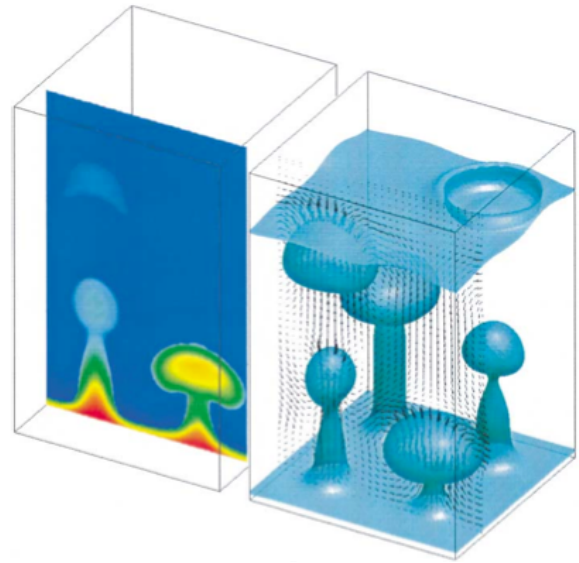


FIGURE 4.3 – (a) Film boiling ([Shin and Juric 2002](#))

L'interface est alors reconstituée tous les 100 pas de temps (dépend du type d'étude) à partir de points définissant une isovaleur de cette fonction d'indication. La finesse de l'interface est donc celle du maillage eulerien.

Les premiers développements de méthode Front-Tracking sans connectivité sur les points désignant l'interface ont été faits par [Torres and Brackbill \(2000\)](#), grâce à la méthode nommée "the point-set method". Dans cette méthode, la fonction indicatrice permettant de définir si les points sont situés à l'intérieur ou à l'extérieur de l'interface est calculée en plusieurs étapes. Toutefois, cette méthode est complexe, en particulier pour l'étape de régénération de points sur l'interface. Peu après, [Shin et al. \(2005\)](#) présente une méthode de Front-Tracking dans laquelle la fonction d'indication est calculée de manière locale et permet d'avoir une meilleure distribution de la masse surtout en cas de changement topologique de l'interface.

Dans [Bunner and Tryggvason \(2003\)](#); [Toutant \(2006\)](#) des simulations diphasiques tridimensionnelles avec le Front-Tracking sur des écoulements à bulles ou à surface libre ont été conduites avec succès. Par conséquent, malgré les difficultés de développement, les méthodes

Front-tracking gagnent de plus en plus la confiance de la communauté en prouvant leur fiabilité en trois dimensions.

4.2.2.2 Méthode à maillage mobile

Afin de gagner en précision, on peut mailler explicitement l'interface avec le maillage eulérien. Ce sont les méthodes de maillage mobile dans lesquelles les relations de sauts sont naturellement écrites comme conditions limites du maillage eulérien au niveau des noeuds de celui-ci 4.4(a).

Dans Shi and Yu (2005), les auteurs récapitulent les différentes méthodes à maillage mobile et montrent que celles-ci peuvent être appliquées sur des problèmes physiques très variés et plus particulièrement les problèmes diphasiques incompressibles à interface.

Par exemple, ces méthodes sont utilisées dans Rivero and Fabre (1995) et Magnaudet and Mougin (2003) pour l'étude des bulles sphériques. Les conditions de sauts à travers l'interface sont parfaitement prises en compte. On trouve également ce genre de techniques dans les problèmes à surface libre Bouffanais (2007); Fabbro (2007).

Ce genre de méthodes montre ses limites lorsque les mailles du domaine de calcul deviennent fortement déformées. Un remaillage devient nécessaire Duraiswami and Prosperetti (1992).

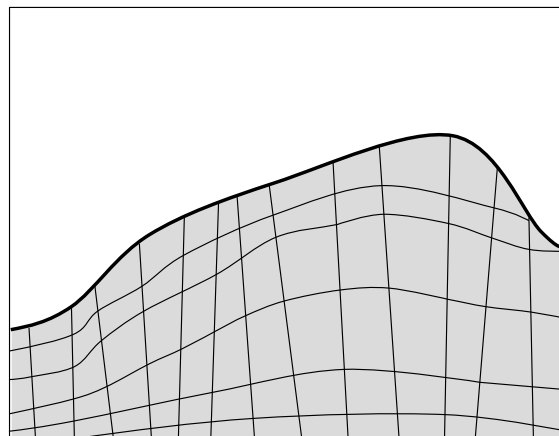


FIGURE 4.4 – (a) Maillage Mobile

Dans Fukai (1993), les auteurs présentent une technique de suivi d'interface à maillage mobile dans laquelle l'interface est remaillée selon un critère de déformation sur les mailles. Si les mailles sont considérées comme trop déformées, alors un calcul d'intersection entre le maillage initial et l'interface est effectué. Les points d'intersection deviennent les points du maillage. A partir de ces points d'intersection, l'interface est redéfinie à partir d'une interpolation par spline cubique afin de conserver le volume. Dans Fukai (1995), cette technique est appliquée à l'impact d'une goutte sur un substrat et comparée avec des résultats expérimentaux qui montrent une excellente modélisation du phénomène.

Dans [Occelli \(1998\)](#), les auteurs présentent une méthode de suivi d'interface en deux dimensions dans laquelle l'interface est suivie de manière eulerienne par une pseudo-fonction de concentration. Les mailles du maillage eulérien dans lesquelles l'interface passe sont subdivisées de façon à ce que l'interface soit maillée explicitement dans le maillage eulérien ce qui permet de voir l'interface comme une discontinuité et ainsi d'appliquer les conditions limites d'interface avec une précision élevée. Cette technique est testée avec succès sur deux problèmes bidimensionnels tels que l'instabilité de Rayleigh-Taylor et la rupture d'un barrage d'eau dans l'air. Cependant, ces méthodes s'avèrent très compliquées en trois dimensions et les changements de topologie de l'interface ne sont pas traités.

4.2.2.3 Méthode mixte ou "Hybride"

Ainsi, les méthodes Euleriennes et Lagrangiennes comportent toutes les deux des avantages et des inconvénients. Des méthodes hybrides, à la fois Lagrangiennes et Euleriennes ont été développées dans le but de concilier les avantages des deux types de méthodes.

Dans [Di et al. \(2007\)](#), les auteurs détaillent le couplage d'une méthode Level-Set avec une méthode à maillage mobile (figure 4.5(a)) et démontrent que leur technique de maillage mobile permet d'avoir des résultats comparables à un maillage fixe à la résolution plus élevée. Par conséquent, ils démontrent également que le temps de calcul à précision égale entre un maillage mobile et un maillage fixe est moindre dans le cas du maillage mobile. L'avantage du couplage avec une méthode Level-Set est que les changements de topologie de l'interface ne sont pas un problème. Cependant cette méthode semble posséder les inconvénients des méthodes Level-Set concernant la non conservation de la masse.

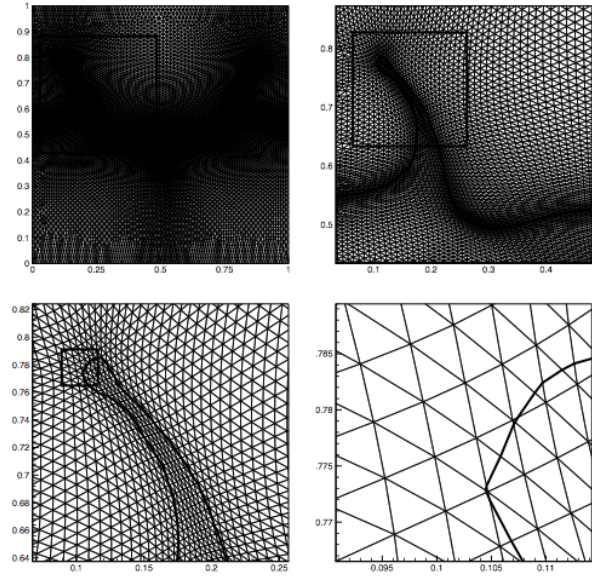


FIGURE 4.5 – (a) Maillage mobile et Level Set : Yana Di et Tao Tang (2007)

Un résumé des méthodes hybrides récemment développées est présenté dans [Vincent et al. \(2010\)](#). Ce type de méthode couple l'évolution Lagrangienne de l'interface, défini par un ensemble de marqueurs, à la fonction de concentration des phases (fonction VOF) de la grille Eulerienne. Ceci évite la diffusion numérique de l'interface au niveau de la discrétisation Eulerienne. Vincent dans [Vincent et al. \(2010\)](#), soumet sa méthode hybride, nommé "Volume Of Fluid Sub-Mesh" (VOF-SM), aux tests classiques d'advection d'une tache cisailée par un champ tournant périodique dans un écoulement diphasique 3D. La précision obtenue sur la conservation de la masse est excellente. L'ordre de convergence spatiale de cette méthode est de 3. La capacité de cette technique à modéliser des problèmes d'écoulement diphasique, est illustrée avec succès sur des maillages cartésiens et curvilignes. Toutefois, dans ce genre de méthodes, les propriétés des interfaces ne sont pas explicitement décrites car celles-ci sont interpolées sur la grille eulérienne.

4.2.3 Synthèse bibliographique

Dans le but de modéliser le problème décrit dans le chapitre 1, la précision sur la description de l'interface apparaît capitale car dans notre problème, les interfaces sont le berceau des mécanismes physiques mis en jeu. C'est pourquoi, après avoir passé en revue les différentes méthodes existantes, les méthodes à maillage mobile ont la particularité d'intégrer explicitement l'interface au domaine d'étude. Dans ces méthodes, l'interface est un sous-domaine du domaine d'étude. Par conséquent, l'interface et les propriétés particulières qui en découlent sont très précisément intégrées à la résolution des équations de conservation. Comme évoqué plus haut, l'inconvénient de ce genre de méthode semble être la robustesse. En effet, lorsque les interfaces sont soumises aux fortes déformations, ces méthodes deviennent compliquées. Nous proposons une technique de maillage mobile autorisant, par une approche simple, le passage de noeuds à travers l'interface. Ceci permet de conserver des mailles régulières même en cas de fortes déformations.

La méthode proposée est développée en trois dimensions et semble avoir un potentiel intéressant pour l'étude des problèmes à changement de phase avec ligne de contact.

4.3 Méthode de suivi d'interface 3D

4.3.1 Principe de la méthode

La méthode présentée ici se place dans la catégorie des méthodes de suivi d'interface Lagrangienne. L'interface est constituée par un maillage surfacique à l'aide d'éléments quadratiques à trois sommets (T6 à six points figure 4.8). Le maillage du domaine d'étude utilise des éléments quadratiques type H27 représentant un volume à 6 faces et constitués de 27 points (figure 4.7). La connectivité du maillage de l'interface est initialement connue.

Le principe de base de la méthode consiste à projeter les points du maillage du domaine d'étude qui sont les plus proches de l'interface sur les éléments (T6) constituant celle-ci. Ainsi, les points projetés du domaine d'étude sont situés exactement sur l'interface et les conditions limites de la physique des interfaces, conditions de sauts ou modèle de ligne triple, peuvent être appliquées en ces points avec exactitude et (à priori) sans le moindre lissage.

Ensuite, l'interface est remaillée à partir des points du domaine d'étude projetés. Cela permet également de conserver des mailles régulières et sans grandes déformations pour caractériser l'interface.

L'advection de l'interface a pour but de se faire en considérant la physique du problème. En effet, dans le cadre de l'étude de la dynamique des interfaces lors de changement de phase, le champ de vitesse de l'interface sera déterminé après résolution des équations de conservation. Il résulte de la variation de masse entre les phases. Ainsi, après résolution des équations de conservation, ce champ de vitesse est connu aux points du domaine d'étude qui ont été projetés sur l'interface.

La méthode se décompose en quatre tâches principales :

- La tâche initiale consiste en l'advection de la surface. L'advection se fait en général à partir d'un champ de vitesse déterminé par la physique du problème. Le déplacement de l'interface résulte du produit entre le champ de vitesse et le pas de temps de l'itération en cours. Ce produit peut être traité à l'ordre 1 avec des schémas de type Euler ou à des ordres plus élevés avec des schémas de type Runge Kutta (ordre 2 ou 4). Le pas de temps peut être imposé ou calculé dynamiquement. Un critère CFL inférieur à 1 est respecté. La partie 4.3.5.3 traite de l'advection de la surface.
- Une tâche consiste à localiser l'interface dans le domaine d'étude. Différentes techniques existent, la solution retenue est purement géométrique et consiste à détecter les arêtes des mailles du domaine d'étude coupant le maillage surfacique. Dans cette étape, décrite dans la section 4.3.3, on détermine également l'état (gaz ou liquide) des sommets de la maille ayant vu l'interface. Pour ce faire un algorithme de calcul d'intersection droite-triangle est appliqué.
- Une des tâches consiste en la projection des points situés proche de l'interface. Les points à projeter sont sélectionnés par la première étape. Ces points sont projetés sur l'interface de façon à ce que la distance de projection soit minimale. Une projection

respectant l'ordre quadratique des éléments de surface et de volume est faite afin de minimiser l'erreur due à la projection. Cette étape est détaillée dans la section 4.3.5.

- Une autre tâche dite de remaillage de la surface consiste à redéfinir la topologie du maillage surfacique. Il s'agit de déterminer un maillage surfacique constitué de triangle $T6$ ainsi que sa table de connectivité à partir des points projetés. Cette étape utilise la définition des états de la première étape pour ensuite appliquer l'algorithme de reconstruction d'isosurface connu sous le nom de "marching cubes" [Lorensen and Cline \(1987\)](#). Comme présenté dans la partie 4.3.4 cet algorithme a été adapté à notre étude et cela permet d'obtenir le remaillage de l'interface ainsi que sa connectivité qui n'est autre qu'un sous-maillage du domaine d'étude.

En réalité l'ordre séquentiel de la méthode est le suivant :

Après l'advection des coordonnées de l'interface, advection de la matrice surface, une première étape consiste à localiser l'interface dans le maillage du domaine d'étude. C'est à dire déterminer les mailles qui coupent l'interface. Au cours de cette étape, la définition des états des sommets des mailles (gaz ou liquide) est effectuée. On détermine également lequel des points extrêmes de l'arête de la maille est le plus près de l'interface afin d'être projeté sur celle-ci. L'indice de ce point est enregistré dans une variable *MarqueurEdge*.

Dans une seconde étape on applique l'algorithme de marching cubes qui crée la topologie des triangles de la nouvelle interface au sein des mailles. Cet algorithme considère les états des sommets de la maille et renvoie des trinômes d'arêtes permettant de définir les triangles constituant l'interface au sein de la maille. Chaque arête d'un trinôme porte l'information, grâce à la variable *MarqueurEdge*, donnant lequel de ses deux points extrêmes est à projeter. Si les trois points renvoyés par les arêtes d'un trinôme sont différents, alors la topologie d'un triangle est créée à partir des indices de ces trois points qui seront projetés dans l'étape de projection. Ces trois points constituent les indices des trois sommets du futur $T6$. Ces points constituent également, soit des arêtes du $H27$ soit des diagonales. Par conséquent afin de créer la topologie d'un $T6$, l'indice du point central correspondant à l'arête ou à la diagonale est également déterminé et inclus dans la table de connectivité des indices des $T6$. L'étape de projection consiste à lire la table de connectivité des indices des $T6$ précédemment créés et à projeter les points dont les indices ont été lus, points appartenant au maillage volumique, sur le maillage advecté de l'interface de l'itération précédente. Sauf en cas de bordure du domaine fluide, cette projection se fait de façon orthogonale.

La nouvelle matrice contenant les coordonnées de l'interface est alors mise à jour à partir des points dont les indices sont contenus dans la table de connectivité des $T6$.

Après résolution des équations de conservation cette matrice sera de nouveau advectée et la procédure recommence à partir d'un maillage volumique régulier. Toutefois, pour le moment, l'interface est uniquement advectée de façon artificielle.

Algorithme 1 : Suivi d'interface

Données : Ω (maillage régulier du domaine d'étude), Σ (maillage advecté de l'interface)

Sorties : Σ_{new} (nouveau maillage de l'interface), Ω_{new} (maillage projeté du domaine d'étude)

début

- Soit $Vcolor$ fonction d'indication dont le signe porte l'information de l'état gaz liquide des noeuds du maillage
- Soit $MarqueurEdge$ variable contenant pour chaque arête coupant l'interface l'information sur lequel des points extrêmes de l'arête est le plus près de l'interface
- Soit $T6_i$ vecteur contenant les indices des points de surface de la maille i

pour tous les $Mailles \in \Omega$ **faire**

 CalculIntersection $\rightarrow (\Omega_i \cap \Sigma)$

si $\Omega_i \cap \Sigma \neq \emptyset$ **alors**

 Actualisation($Vcolor$)

$MarqueurEdge \leftarrow indiceVertex(v_j)$

pour tous les $\Omega_i \cap \Sigma \neq \emptyset \in \Omega$ **faire**

 MarchingCube($Vcolor, MarqueurEdge$) $\rightarrow (v_1, v_2, v_3)$

si $v_1 \neq v_2 \neq v_3$ **alors**

$T6_i \leftarrow (v_1, v_2, v_3)$

pour tous les $\Omega_i \cap \Sigma \neq \emptyset \in \Omega$ **faire**

$\Omega_{new_i} \leftarrow Projection(T6_i(v_1, v_2, v_3))$

$Vcolor(v_1, v_2, v_3) \leftarrow 0$

pour tous les $T6_i \neq \emptyset \in \Sigma$ **faire**

$\Sigma_{new_i} \leftarrow \Omega_{new_i}(T6_i(v_1, v_2, v_3))$

fin

Le schéma 4.6 illustre les différentes étapes de l'algorithme.

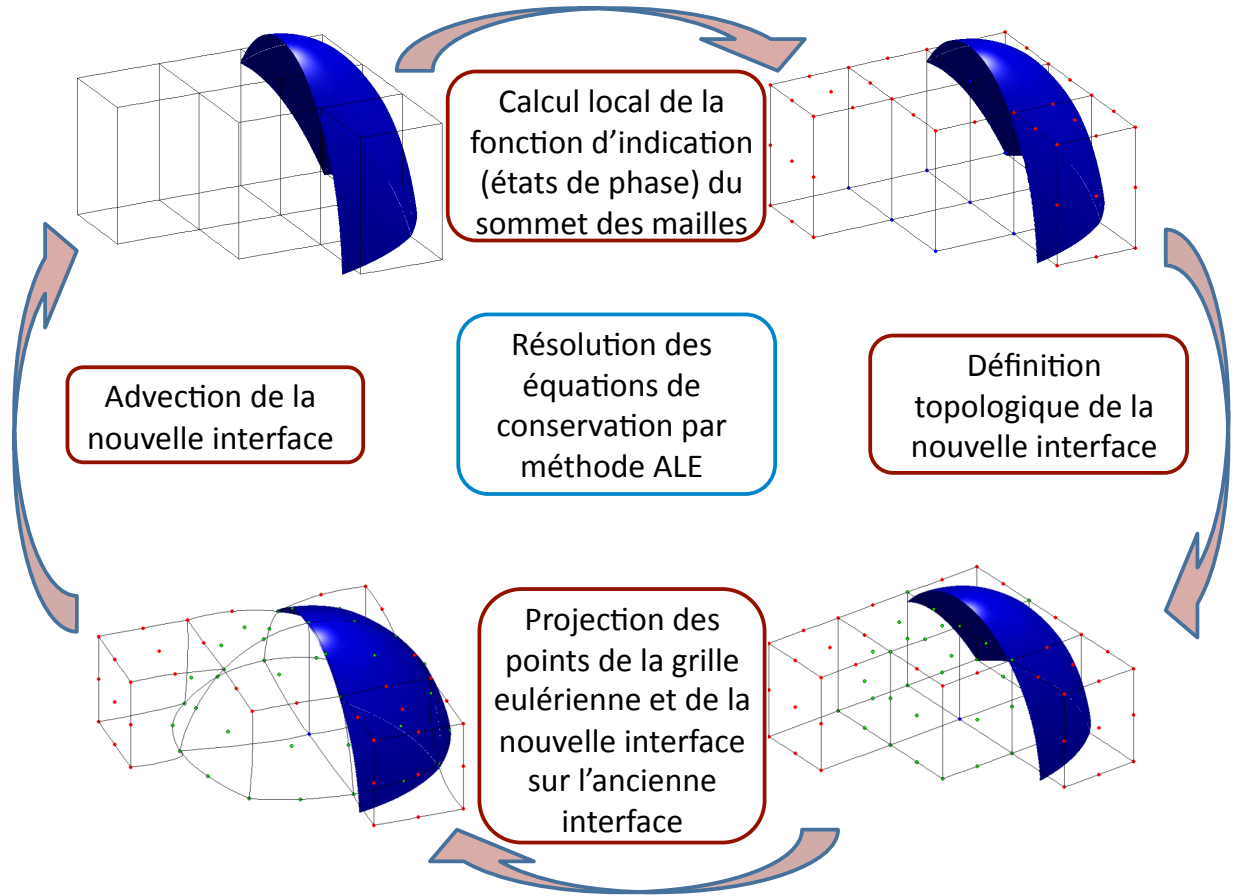


FIGURE 4.6 – Schéma récapitulatif des différentes étapes de la méthode de suivi d'interface

4.3.2 Définition des grandeurs discrètes

Nous utiliserons les conventions de notations suivantes pour les grandeurs discrètes :

- Le maillage volumique en 3 dimensions du domaine d'étude portera la notation Ω , le domaine élémentaire de ce maillage correspondant à une maille $\in \Omega$ est noté Ω_i . Les valeurs élémentaires des variables seront également indicées par i .
- Le maillage surfacique de l'interface portera la notation Σ , un triangle élémentaire de cette surface sera noté Σ_i .

4.3.2.1 Le maillage du domaine d'étude

Le domaine d'étude est maillé de façon régulière avec un maillage structuré d'éléments à six faces. Ces éléments sont des éléments de Lagrange type H27. Ils sont constitués de 27 noeuds numérotés de façon ordonnées. Le maillage étant ordonné, chaque maille connaît ses voisins. Le volume ainsi que la surface des faces de ce type d'élément sont donnés par les fonctions de forme issues de la discrétisation éléments finis. Cela revient à une paramétrisation de

l'élément dans un domaine de définition élémentaire des paramètres des fonctions de forme. Grâce à ces fonctions de formes on a donc une description continue des variables élémentaires au sein de l'élément. L'exactitude de cette description va dépendre de l'ordre des fonctions de forme des éléments. Dans le cas de l'élément H27, l'ordre de cette description est de 3.

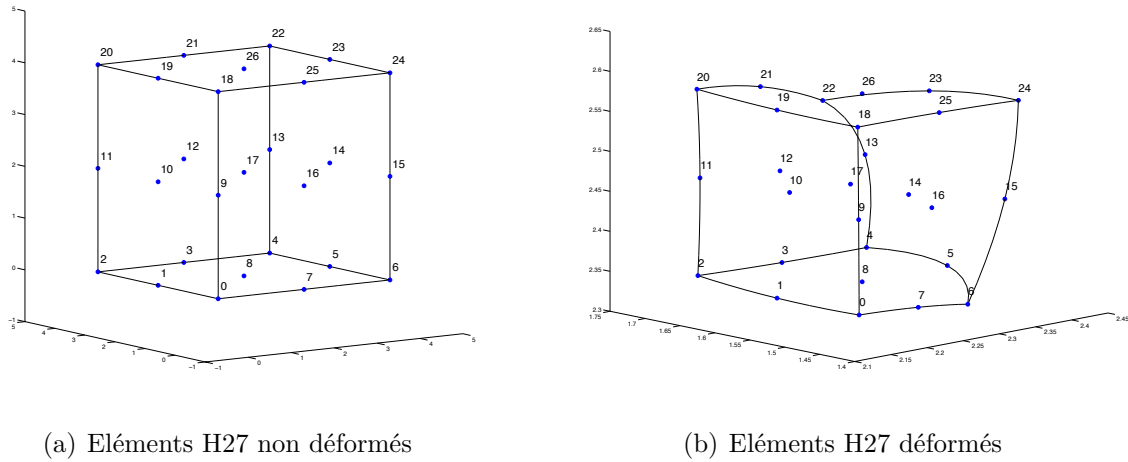


FIGURE 4.7 – Élément H27 numéroté

Cet élément est de classe C^0 et utilise une approximation quadratique de Lagrange dans les trois directions ξ , η , ζ .

Le domaine élémentaire est alors interpolé par l'expression suivante :

$$X(x, y, z) = \sum_{i=1}^{27} N_i(\xi, \eta, \zeta) X_i \quad (4.3)$$

ξ , η , $\zeta \in [-1, 1]$ paramètres élémentaires.

$X_{i=\{1,2,..,27\}}$ coordonnées des noeuds de l'élément.

Les fonctions de forme N_i sont construites à l'aide des 27 triplets obtenus par combinaison des valeurs de $N_i(v)$ données dans la table 4.1 avec les trois variables élémentaires ξ , η , ζ .

Donc les fonctions N sont de la forme :

$$N(\xi, \eta, \zeta) = N(\xi) \cdot N(\eta) \cdot N(\zeta) \quad (4.4)$$

4.3.2.2 Le maillage de l'interface

En trois dimensions, l'interface est définie par un maillage constitué d'une réunion d'éléments quadratiques triangulaires à 6 noeuds, élément T6 (figure 4.8).

TABLE 4.1 – Fonction de forme élémentaire d'un élément L3

	{ N }
1	$-\frac{1}{2}v(1-v)$
2	$(1-v^2)$
3	$\frac{1}{2}v(1+v)$

Pour le bon fonctionnement de l'algorithme, le maillage surfacique doit vérifier certaines propriétés topologiques :

- Deux triangles de l'interface ne se coupent jamais.
- Soit les interfaces sont fermées, soit leurs extrémités (arêtes des triangles n'appartenant qu'à un seul triangle) sont situées sur le bord du domaine fluide.
- La numérotation des noeuds constituant un élément de l'interface est de telle sorte que la normale soit toujours orientée du même côté par rapport à la phase (par exemple gaz).

Ces propriétés assurent la cohérence topologique du maillage, en particulier la définition du contenu (gaz ou liquide) des volumes définis par les interfaces.

Cet élément est de classe C^0 et utilise une approximation quadratique de Lagrange dans les deux directions ξ , η .

La surface élémentaire est alors interpolée par l'expression suivante :

$$X(x, y, z) = \sum_{i=1}^6 N_i(\xi, \eta) X_i \quad (4.5)$$

$\xi \in [0, 1]$ et $\eta \in [0, 1 - \xi]$ paramètres élémentaires.

$X_{i=\{1,2,..,6\}}$ coordonnées des noeuds de l'élément.

Les fonctions de forme N_i sont données dans la table 4.2 avec les deux variables élémentaires ξ , η .

$$\lambda = 1 - \xi - \eta \quad (4.6)$$

TABLE 4.2 – Fonction de forme élémentaire d'un élément T6

	{ N }
1	$-\lambda(1 - 2\lambda)$
2	$4\xi\lambda$
3	$-\xi(1 - 2\xi)$
4	$4\xi\eta$
5	$-\eta(1 - 2\eta)$
6	$4\eta\lambda$

Les points du $T6$ sont numérotés de telle sorte que du point de vue du liquide on tourne dans un certain sens. Une numérotation ordonnée des points constituant le $T6$ permet de définir une base locale au sein de l'élément de surface qui sert de référence au calcul de la normale. Ainsi la normale prend une orientation en fonction de l'état de phase du fluide.

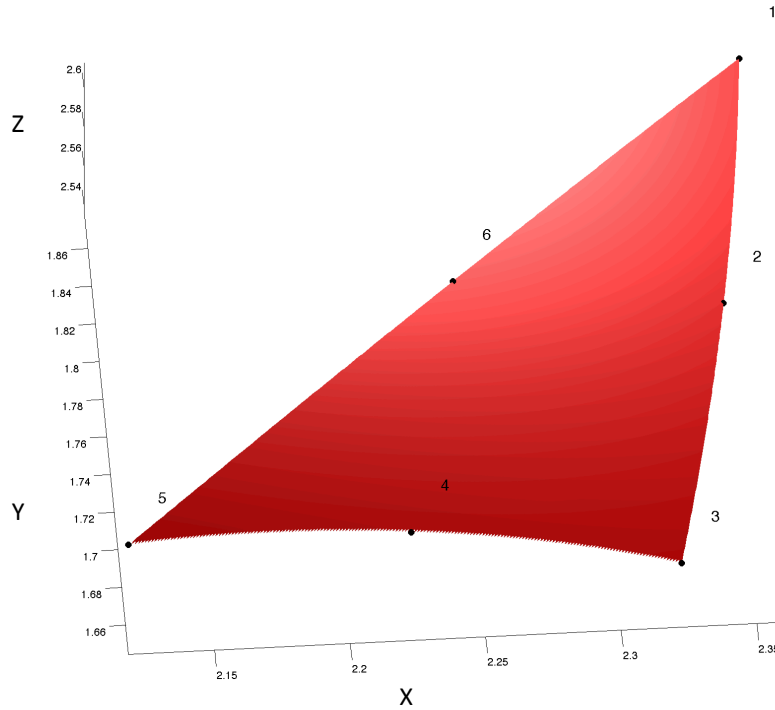


FIGURE 4.8 – Élément T6 numéroté

4.3.3 Localisation de l'interface dans le maillage

Le but de cette étape est de déterminer l'intersection entre le maillage du domaine fluide et le maillage surfacique de l'interface. La définition de l'état de phase de chaque point du domaine est également effectuée en conséquence de cette intersection. Le fonctionnement général de l'algorithme relatif à cette étape est le suivant :

- Pour chaque élément, du domaine fluide, on boucle sur les 12 arêtes de l'élément H27
- Pour chaque arête, on boucle sur les éléments de l'interface
- Si il y a intersection entre l'arête et un élément de l'interface, alors on détermine quels sont les états de phase des noeuds extrêmes de l'arête intersectée

4.3.3.1 Méthode de calcul d'intersection

Le calcul d'intersection entre une arête du maillage volumique et un élément du maillage surfacique se fait en décomposant chaque T6 en 4 triangles linéaires figure 4.9.

Des calculs d'intersections tenant compte de la non linéarité des éléments ont été faits avec l'algorithme de Newton Raphson. Cela n'apporte rien à la méthode et augmente considérablement le temps d'exécution de cette étape. De plus il peut arriver que l'algorithme de Newton Raphson ne converge pas vers la bonne solution ce qui limite ce calcul d'intersection aux interfaces peu courbées.

A partir de l'élément H27 du maillage d'étude (initialement orthogonal), on définit une arête linéaire en ne prenant que les deux points extrêmes parmi les trois que constitue une arête d'un élément H27.

Pour savoir s'il y a intersection entre un élément de surface et une arête, on boucle sur les quatre triangles que constitue le T6 et on applique le calcul suivant :

$$\vec{n} = \vec{u} \wedge \vec{v}; I_u = \frac{(\vec{O}t_r \wedge \vec{v}) \cdot \vec{r}}{\vec{n} \cdot \vec{r}}; I_v = \frac{(\vec{u} \wedge \vec{O}t_r) \cdot \vec{r}}{\vec{n} \cdot \vec{r}}; I_r = \frac{-\vec{n} \cdot \vec{O}t_r}{\vec{n} \cdot \vec{r}}; \quad (4.7)$$

\vec{u} , \vec{v} , $\vec{O}t_r$ et \vec{r} sont illustrés sur la figure 4.9. Il y a intersection entre une arête et un T6 si pour un des quatre triangles, ce calcul vérifie :

$I_u \in [0;1]$ et $I_v \in [0;1-I_u]$ et $I_r \in [0;1]$

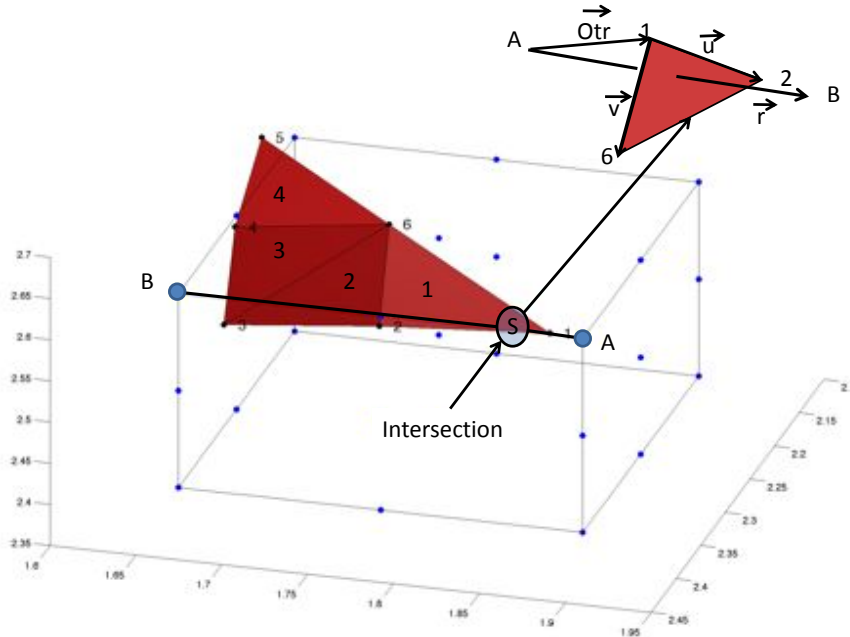


FIGURE 4.9 – Intersection entre une arête et un élément de surface

4.3.3.2 Détermination de l'état de phase des noeuds du maillage volumique

Dans cette partie, on cherche à savoir, dans le cas où une arête a été coupée par l'interface, de quel côté de l'interface se situent les points extrêmes de cette arête. On détermine également lequel des deux points extrêmes de cette arête est le plus proche de l'interface. Cette information est stockée dans une variable locale à l'élément puis globale au domaine. Cette variable sera nommée MarqueurEdge.

Cette information est portée dans la variable I_r :

Si $I_r \leq 0,5$ le point A sera projeté \Rightarrow MarqueurEdge = A

Si $I_r > 0,5$ le point B sera projeté \Rightarrow MarqueurEdge = B

Afin de déterminer quel est l'état de phase des noeuds extrêmes de l'arête coupée, on fait un produit scalaire entre le vecteur du point considéré et le point d'intersection avec le vecteur normal \vec{n} à l'élément triangulaire qui a vu l'intersection. On aura pris soin de numéroté les quatre triangles que l'on constitue avec les points du T6 de telle sorte que l'orientation de la normale des triangles linéaires obtenue par le produit vectoriel entre \vec{u} et \vec{v} soit la même que celle du T6. La normale \vec{n} à l'élément triangulaire étant orientée par rapport à un état de phase, le signe du produit scalaire évoqué nous renseigne sur l'état de phase du point considéré.

Voici une description mathématique des calculs effectués :

Définitions :

Les noeuds du maillage du domaine fluide appartenant à l'état liquide de la phase sont représentés par la valeur -0,5 de la variable Vcolor.

Les noeuds du maillage du domaine fluide appartenant à l'état gazeux de la phase sont représentés par la valeur 0,5 de la variable Vcolor.

Soit \vec{SX} vecteur partant du point d'intersection S au point considéré X (A ou B) (figure 4.9) entre l'interface et l'arête.

L'état de phase est déterminé par l'expression suivante :

$$Vcolor(X) = sign(\vec{SX} \cdot \vec{n}) \cdot 0.5; \quad (4.8)$$

Cas particulier des arêtes coupées par plusieurs éléments

Il arrive assez fréquemment qu'une même arête soit coupée par plusieurs éléments. Cela arrive lorsque les éléments de l'interface sont quasiment tangents à l'arête. La méthode évoquée précédemment peut conduire à des incohérences sur l'état de phase des noeuds ainsi que sur le point que l'on place dans la variable MarqueurEdge si on ne prend pas en compte les différents éléments coupant l'interface pour déterminer l'état de phase des noeuds et le point à projeter.

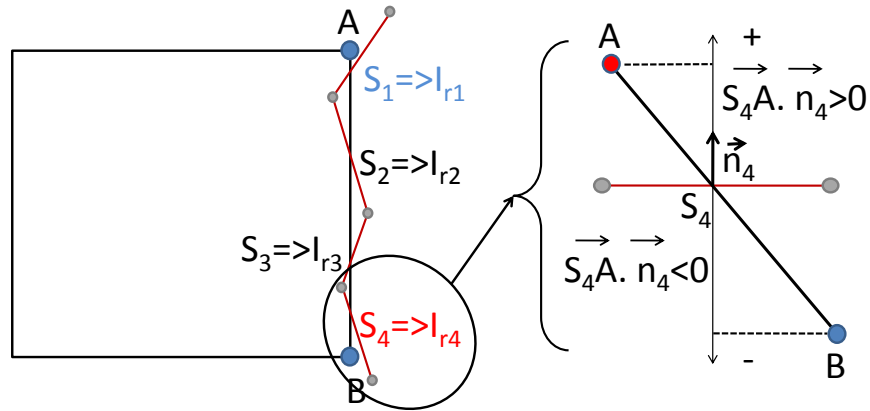


FIGURE 4.10 – Exemple d'intersection entre une arête et plusieurs éléments de surface

La figure 4.10 est une représentation en deux dimensions de ce genre de configuration. A l'image de cette figure si l'on traite toutes les intersections indépendamment avec la méthode précédente, au cours du calcul d'intersection avec l'élément de surface 4, dont le point d'intersection est noté S_4 , le point A va prendre un état de phase différent du point B. En réalité, leurs états sont les mêmes. Afin de palier à ce problème, en cas de multi intersections, le signe du produit scalaire retenu pour le point considéré sera celui dont le point d'intersection est le plus proche du point considéré. Ainsi dans l'exemple de la figure 4.10, le signe du produit scalaire avec la normale de l'élément 4 sera utilisé pour déterminer l'état de phase du point B, cependant pour le point A, le signe du produit scalaire avec la normale de l'élément 1 sera utilisé.

Dans ce cas de figure, il devient difficile de savoir quel est le point le plus judicieux à projeter, celui à passer à la variable MarqueurEdge. En réalité, il y a de forte chance que les deux points soit projetés au final. Cependant l'information sur l'autre point à projeter sera portée par une autre arête. On choisit comme solution pour cette arête, de retenir le point le plus proche du point d'intersection avec un élément. Dans le cas de la figure 4.10 cela n'a pas d'importance car au final, les points A et B ont les mêmes états de phase, donc cette arête ne sera pas sélectionnée par l'algorithme du Marching cubes. Cependant si au lieu d'avoir quatre intersections sur l'arête, il y en a trois, les états de phase seraient différents et l'algorithme de Marching cubes renverrait cette arête. L'information sur le point à projeter deviendrait capitale. L'importance de cette variable MarqueurEdge sera illustrée dans la section 4.3.4.2.

Une conséquence critique de la méthode par rapport au cas de figure des multi intersections est la perte d'information sur l'interface. En effet, les variations de courbure de l'interface sur une longueur inférieure à la longueur de maille seront gommées.

Propagation des états des sommets non modifiés au cours de l'étape de localisation de l'interface :

Propagation de l'état des sommets dans une maille coupant l'interface :

Il peut arriver qu'un noeud de sommet appartenant à une maille contenant l'interface se soit retrouvé de l'autre côté de l'interface sans que les trois arêtes partant de ce noeud aient vu une intersection avec l'interface. Dans ce cas de figure, l'état de phase du noeud considéré est faux si il n'est pas modifié. La méthode proposée est la suivante :

- On dénombre les sommets de la maille non actualisés par la méthode précédente.
- Tant que ce nombre n'est pas nul, l'état de phase d'un sommet non actualisé prend la valeur de l'état de phase d'un sommet actualisé appartenant à l'autre extrémité d'une de ses arêtes.

Propagation de l'état de phase des sommets d'une maille non coupée par l'interface :

Il s'agit ici d'actualiser l'état de phase des sommets des mailles, qui après advection de l'interface n'ont plus d'arêtes coupant l'interface. Dans ce genre de configuration certains noeuds de ces mailles peuvent avoir des états différents alors que tous les sommets de la maille sont situés du même côté de l'interface ce qui mène à des configurations fausses. Pour palier ce problème voici la méthode proposée :

- On dénombre les sommets du domaine non actualisés
- Tant que ce nombre n'est pas nul, les états de phase des sommets de la maille sont égaux à un état de phase d'un sommet qui a été actualisé.

Nous verrons dans la partie optimisation en quoi les méthodes de propagation proposées ci-dessus sont peu coûteuses en temps de calcul.

4.3.4 Définition topologique de la nouvelle surface

L'étape de localisation de l'interface dans le maillage a permis de définir les états de phase des noeuds du domaine d'étude. A partir de cela, l'interface se situe au niveau de la discontinuité de cet état de phase. Plus concrètement on a vu que dans la phase liquide, les états de phase avaient une valeur négative tandis que dans la phase gazeuse ceux-ci prenaient des valeurs positives.

Dans cette partie nous allons définir la topologie d'une surface cohérente située au niveau de la discontinuité de l'état de phase. Pour ce faire nous allons utiliser l'algorithme de reconstruction d'isosurface connu sous le nom de Marching Cubes [Newman and Yi \(2006\)](#) [Lorensen](#)

and Cline (1987).

Cet algorithme produit une interface d'éléments triangulaires. Cette interface est cohérente et quasiment non trouée. Dans notre situation, chaque triangle de cette interface sera constitué de trois des huit sommets d'un des éléments cubiques du maillage d'étude. C'est à partir des états de phases des huit sommets du cube que les trois sommets constituant un triangle sont choisis de telle sorte que l'interface globale ainsi reconstituée soit exempte de trous. C'est le point fort de cet algorithme.

Dans une première partie, nous allons voir le fonctionnement de cet algorithme puis dans un second temps nous verrons comment celui-ci est adapté à notre méthode.

4.3.4.1 Algorithme du Marching cube

Cet algorithme parcourt la valeur des états de phase des huit sommets de chaque maille et détermine les triangles à créer (si triangle à créer il y a) pour représenter une partie de l'isosurface contenue dans la maille.

Au sein d'une maille, chaque sommet de celle-ci peut prendre deux états : liquide ou gazeux. Il y a huit sommets par maille. Ainsi il existe 2^8 configurations de maille possible. Il existe donc au final 256 configurations de maille.

Les 256 valeurs du tableau de configurations des polygones sont précalculées par réflexions et symétries à partir de 15 cas possibles. Ces différents cas sont représentés sur la figure 4.11.

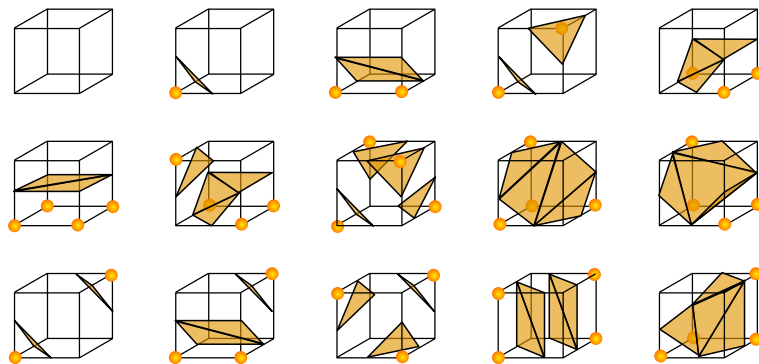


FIGURE 4.11 – Les 15 cas possibles de configurations des polygones

Pour savoir quelle est la configuration d'une maille, on traite chacun des sommets comme un bit dans un nombre entier de 8 bits. Si l'état de phase du sommet traité correspond à l'état gazeux, (c'est à dire à un côté de l'interface), alors le bit correspondant est mis à 1, sinon il est mis à 0. La valeur finale après le test des huit sommets nous renvoie à une ligne d'une table contenant les 256 configurations précalculées.

Pour une configuration donnée, une des lignes de cette table contient les triplets d'arêtes sur lesquelles se situent les points formant les triangles de l'isosurface au sein de la maille.

La table de connectivité d'éléments triangulaires de l'isosurface est alors créée.

Dans la majorité des cas l'interface reconstruite ne présente pas de trou. Cependant dans des configurations très particulières, certaines ambiguïtés peuvent apparaître sur la reconstruction de l'interface. [Van Gelder and Wilhelms \(1994\)](#) [Chernyaev \(1995\)](#) [Natarajan \(1994\)](#). En effet, sept topologies, (cas 3, 4, 6, 7, 10, 12 et 13) peuvent être constituées de façons différentes. Cela peut générer l'apparition de trous dans la surface. Ces cas n'ont pas été détectés dans les test effectués avec notre méthode. Or l'apparition de trous dans l'interface génère, dans notre méthode, des incohérences topologiques qui se propagent très rapidement et mènent à la disparition de l'interface. Il est difficile de savoir si l'adaptation du *marching cube* dans notre méthode évite ces ambiguïtés ou si les cas tests effectués n'engendrent pas ces ambiguïtés. Toutefois il existe des algorithmes permettant de traiter correctement ces configurations ambiguës [Nielson and Hamann \(1991\)](#). Une autre méthode similaire au *marching cube* communément appelée *Marching tetra*, subdivise un cube en six tétraèdres [Carneiro et al. \(1998\)](#). Cette méthode ne semble pas souffrir des ambiguïtés relatives aux *marching cubes*.

4.3.4.2 Création de la nouvelle connectivité de l'interface

Cette partie explique comment les informations renvoyées par l'algorithme du *Marching Cubes* sont traitées et adaptées à notre méthode.

On a vu que pour une configuration donnée, l'algorithme précédent renvoie des triplets d'arêtes sur lesquels se situent les points qui forment les éléments triangulaires de l'interface. En effet, à partir d'un triplet d'arêtes on peut constituer un triangle.

Dans l'algorithme classique, le point du triangle appartenant à l'arête renvoyée, est calculé par interpolation des valeurs des états de phase des extrémités de l'arête.

Dans la phase de localisation de l'interface, on a créé un vecteur, *MarqueurEdge*, qui contient le point des deux extrémités d'une arête le plus proche de l'interface. Ainsi, pour chaque arête renvoyée dans un triplet d'arête du *Marching cube*, on a l'information sur le point du triangle potentiellement créé relatif à cette arête.

Ainsi, dans notre cas de figure, l'information contenue dans le vecteur *MarqueurEdge* pour les triplets d'arêtes va nous informer sur les points du triangle créé. Il découle de ceci trois configurations différentes :

- Les trois points renvoyés par le vecteur *MarqueurEdge* pour le triplet d'arêtes renvoyé par le *MarchingCubes* sont différents, un triangle avec ces trois points est créé, figure [4.12\(c\)](#).
- Les trois points renvoyés par le vecteur *MarqueurEdge* pour le triplet d'arêtes renvoyé par le *MarchingCubes* ne sont pas tous différents, on ne crée pas de triangle, figure [4.12\(b\)](#) et [4.12\(a\)](#).

Dans ce dernier cas, on peut avoir, soit trois fois le même point, soit deux fois le même point et un point différent.

La cohérence du maillage de l'interface est dans ce cas de figure assuré par les éléments voisins du domaine.

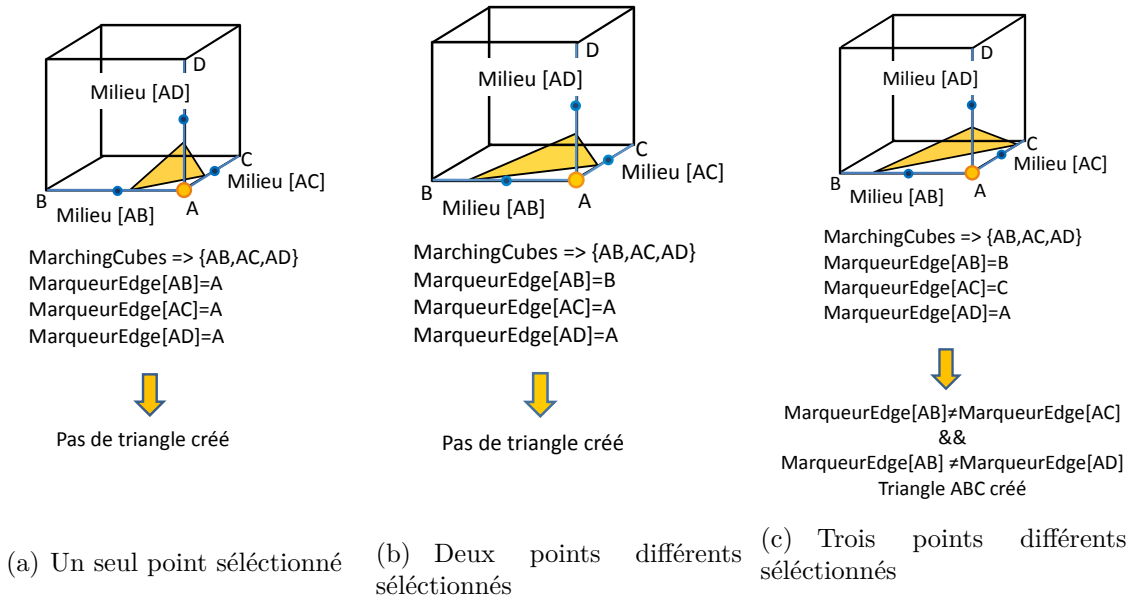


FIGURE 4.12 – Création de triangle : différents cas de figures

En référence à la figure 4.12(a) on voit que l'interface coupe les arêtes AD, AC et AB de l'élément. L'algorithme du Marching Cubes nous renvoie, dans ce cas, le logique triplet d'arêtes {AB, AC, AD}. Cependant, l'intersection de l'interface avec ces trois arêtes se trouve plus proche du point A que des points B, C, D pour les arêtes respectives AB, AC, AD. Ainsi, au cours de l'étape de localisation de l'interface, pour ces trois arêtes, le vecteur MarqueurEdge contiendra l'indice du point A et aucun triangle ne sera créé. En revanche, le point A sera projeté car il appartiendra forcément à un triangle dans un élément voisin.

Dans le cadre de la figure 4.12(c), on voit que pour les arêtes AB et AC, l'interface coupe ces arêtes de l'autre côté du milieu de ces arêtes par rapport au point A. Par conséquent, le vecteur MarqueurEdge contient le point B pour l'arête AB, le point A pour l'arête AD et le point C pour l'arête AC. Les trois points sélectionnés étant différents, on peut donc créer un triangle d'interface avec ces trois points et les points du triangle A,B,C seront projetés sur l'interface.

De cette façon on recrée la nouvelle connectivité de l'interface. Ainsi pour chaque élément du maillage volumique coupé par l'interface, on a créé la connectivité des éléments surfaciques

se situant au sein de cette maille.

Les points de cette nouvelle connectivité sont projetés sur l'ancienne interface. Le détail de cette projection est fourni dans la partie 4.3.5.

On notera que le maillage surfacique n'est finalement qu'un sous maillage du maillage volumique. On verra dans la section 4.4.2 en quoi cela allège considérablement le temps d'exécution de la méthode.

On voit sur la figure 4.12 qu'il peut être possible qu'une maille surfacique soit contenue à l'intérieur d'une maille volumique hexaédrique et pas située sur une des faces de l'élément élémentaire volumique. Dans ce cas, l'interface ne serait plus située sur les lignes de maillage du domaine d'étude. Afin de s'abstraire de ce problème, l'élément hexaédrique H 27 sera subdivisé en 6 éléments tétraédriques T 10 lors du calcul élément fini des équations de conservation. L'algorithme du *marching tetra* Carneiro et al. (1998) utilise cette technique et prouve que les arêtes des tétraèdres coïncident avec les arêtes et les diagonales de l'hexaèdre et des ses voisins.

4.3.5 Projection de la nouvelle topologie sur l'ancienne interface : Création de la nouvelle surface

Cette étape consiste en la projection des points indicés par la table de connectivité de la nouvelle interface déterminée dans la section 4.3.4.2. Les points projetés correspondront donc à la fois aux points du domaine projetés sur l'interface et aux points de la nouvelle interface.

Pour réaliser cette étape, le principe est le suivant :

On parcourt les triplets de points de la table de connectivité de la nouvelle interface puis on exécute deux étapes :

- Si le point n'a pas été projeté, on le projette.
- Pour chaque triplet de points, on stocke les coordonnées du triangle projeté dans une matrice surface.

La projection se fait avec une méthode de balayage dichotomique décrite dans la partie suivante. La table de connectivité de l'interface contient uniquement les indices des points extrêmes des éléments T6 de la future interface donc seulement les indices des points extrêmes des arêtes ou des diagonales des éléments volumiques et pas les points centraux. Cependant avec une numérotation élémentaire ordonnée des éléments volumiques, on peut aisément déterminer quel est l'indice d'un point milieu d'une arête ou d'une diagonale à partir de l'indice des deux points extrêmes.

Ainsi dans une première étape, on parcourt la table de connectivité de l'interface pour ne projeter que les points extrêmes. Puis dans un second temps, on parcourt cette même table en relevant les indices des points extrêmes pour en déterminer les trois points milieu d'un triangle puis une fois ces indices déterminés, on projette les points milieu.

4.3.5.1 Méthode de projection à balayage dichotomique

L'étape de localisation de l'interface considérait les éléments d'interface comme des éléments linéaire. On effet, on a vu qu'un élément quadratique de Lagrange était vu comme quatre triangles linéaires. Ceci avait pour but de rendre le calcul d'intersection linéaire, ce qui par conséquent accroît considérablement la vitesse d'exécution de l'algorithme.

Dans cette partie, afin de respecter la précision voulue avec des éléments quadratiques, on va tenir compte de l'aspect quadratique des éléments de surface.

Pour ce faire, on va utiliser la description paramétrique des éléments de surface définis dans la table 4.2 de la section 4.3.2.2.

Projeter le point considéré du domaine sur l'interface revient à trouver le point de l'ancienne interface minimisant la distance entre le point du domaine avant projection et ce point de l'interface.

Le formalisme mathématique de ceci est le suivant :

Pour chaque élément d'interface $\Sigma_i \in \Sigma$, il faut trouver $(\xi_{min}, \eta_{min}) \in \Sigma_i \setminus$

$$|X_{i \in \Omega_i} - X_{\Sigma_i}(\xi_{min}, \eta_{min})| = \min |X_{i \in \Omega_i} - X_{\Sigma_i}(\xi, \eta)| \quad (4.9)$$

Ensuite il faut trouver $\Sigma_{projection} \in \Sigma$ avec $(\xi_{projection}, \eta_{projection}) \in \Sigma_{projection} \setminus$

$$|X_{i \in \Omega_i} - X_{\Sigma_{projection}}(\xi_{projection}, \eta_{projection})| = \min |X_{i \in \Omega_i} - X_{\Sigma_i}(\xi_{min}, \eta_{min})| \quad (4.10)$$

Enfin, on affecte les coordonnées du minimum au maillage du domaine :

$$X_{i \in \Omega_i} = X_{\Sigma_{projection}}(\xi_{projection}, \eta_{projection}) \quad (4.11)$$

Pour ce faire on utilise une méthode de "balayage dichotomique" sur les paramètres ξ et η . La figure 4.13 illustre cette technique. Plus de détails sont donnés en annexe 2.0.3.

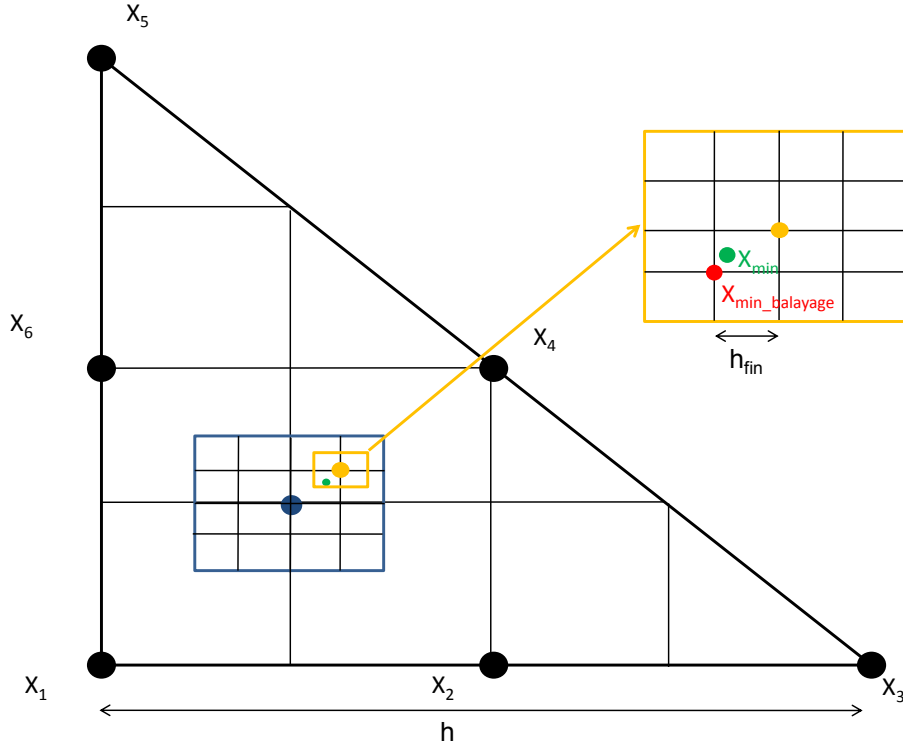


FIGURE 4.13 – Schéma de la méthode de minimisation par balayage dichotomique

Cas particulier des frontières

On appelle frontière les faces des mailles solides en contact avec le fluide. Les points de ces faces sont des noeuds appartenant à la fois à des mailles solides et fluides. C'est pourquoi ces points peuvent être projetés à condition de rester dans le plan de ces faces.

Pour ce faire, on prive la minimisation d'un degré de liberté, celui porté par la normale au plan de ces faces. On minimise ainsi la distance entre le point à projeter et le point de la courbe défini par l'intersection entre le plan de ces faces et l'interface.

La figure 4.14 illustre l'impact d'une sphère dans un angle. Des parois solides, invisibles sur la figure, coupent le maillage par trois plans. On voit que les traces circulaires résultant de l'intersection d'un plan et d'une sphère sont très bien reconstituées par le maillage de l'interface.

Ainsi, les changements de topologie avec les parois solides sont correctement traités.

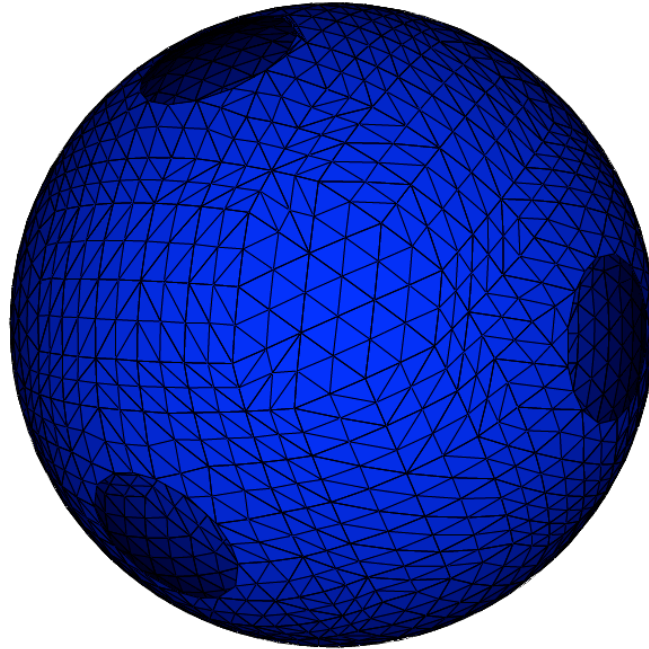


FIGURE 4.14 – Impact d'une sphère dans un angle

4.3.5.2 Création de la matrice surface

Les coordonnées des triangles créés sont stockées dans une matrice surface. Cette matrice est dimensionnée de telle sorte que chaque maille du domaine volumique contient les éléments de surfaces qui la composent. Ainsi, le nombre de lignes de cette matrice est égale au nombre de mailles du domaine.

Pour remplir cette matrice, pour chaque maille du domaine dans laquelle on a créé des triangles, on parcourt la table de connectivité de la surface et à partir des indices de cette table, on stocke les coordonnées relatives aux indices. La première colonne de cette matrice informe sur le nombre de triangles créés dans la maille. On verra dans la partie [4.4.2](#) qu'une telle structure permet de considérablement améliorer le temps d'exécution de la méthode ainsi que sa parallélisation.

4.3.5.3 Advection de l'interface

Les coordonnées des points de l'interface sont stockées dans une matrice, le déplacement de ces points peut se faire par transformation géométrique directement sur les points ou alors,

de façon plus classique, par application d'un champ de vitesse grâce à un schéma en temps conventionnel. Le schéma en temps utilisé pour les différents tests est un schéma de Runge Kutta à l'ordre 4 apprécié pour sa précision. Des schémas allant de l'ordre 1 à 4 sont intégrés à la routine d'advection. Ceux ci sont détaillés dans la partie résultats [5.3.2](#).

4.4 Architecture algorithmique de la méthode

4.4.1 Structure parallélisable

La structure algorithmique de la méthode a été pensée de façon à la rendre parallélisable. Cela nécessite d'avoir une description élémentaire des variables intervenants dans les différentes étapes du processus d'exécution de la méthode. Avec un critère CFL inférieur à 1, seuls les éléments surfaciques contenus dans une maille et ses mailles voisines peuvent interférer un élément après la phase d'advection de la surface. Par conséquent la construction d'une fonction *voisin*, renvoyant l'indice élémentaire des 26 mailles voisines à la maille d'étude, permet l'accès aux éléments de surface contenus dans les mailles voisines. Cette structure rend l'algorithme facilement parallélisable car d'un point de vue spatial, une maille et ses voisines constituent un bloc compact. Ainsi en décomposant le domaine d'étude en sous-domaines, chaque processeur ayant en charge les calculs relatifs à son propre sous-domaine, les communications entre processeurs sont évitées car les blocs compacts sont inclus dans les sous-domaines.

De plus, le maillage du domaine d'étude étant structuré, la construction de la fonction voisin est simple.

4.4.2 Architecture algorithmique : optimisation du temps d'exécution

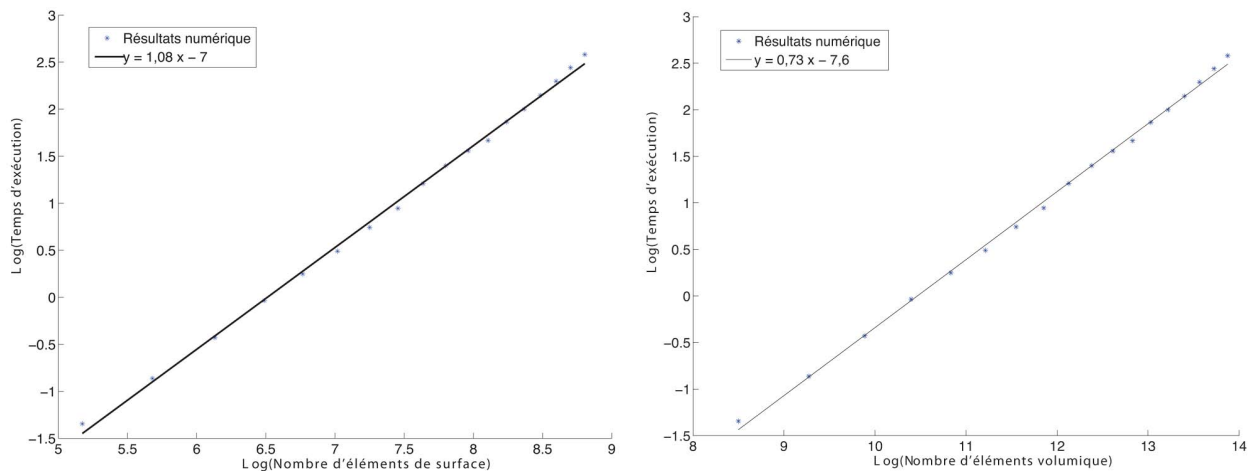
On a vu précédemment que la méthode de suivi d'interface se décomposait en quatre étapes principales :

- Localisation de l'interface dans le domaine de calcul
- Définition topologique de la nouvelle interface
- Projection des points du maillage constituant la nouvelle interface sur l'ancienne
- Advection de la nouvelle interface

On a également vu que l'on respectait un critère CFL inférieur à 1. De ce fait, d'une itération à une autre, l'interface se propage dans le maillage d'une distance inférieure à la taille d'une maille. Ainsi, seules les mailles au voisinage de l'interface à l'itération précédente peuvent couper l'interface à l'itération suivante. Il est donc inutile d'effectuer les trois premières étapes de l'algorithme sur tous les éléments du domaines d'étude. Par conséquent, ces étapes sont

effectuées sur les éléments au voisinage direct de l'interface.

Pour ce faire, on boucle sur tous les éléments du maillage. Pour chaque élément, on consulte la première colonne de la matrice surface à l'indice de l'élément et de ses éléments voisins grâce à la fonction voisin. Si l'on trouve des éléments surfaciques dans la matrice surface, alors on effectue les trois premières étapes de l'algorithme. Si il n'y a aucun élément de surface contenue dans la première colonne de la matrice surface, alors on traite l'élément du domaine volumique suivant. Cela permet d'optimiser considérablement le temps d'exécution des trois premières étapes de l'algorithme en minimisant le nombre d'opérations inutiles. Avec une telle approche, on obtient un algorithme dont le temps d'exécution dépend quasiment linéairement du nombre d'éléments surfaciques et non du nombre d'éléments volumiques. Afin de vérifier cela, une même transformation géométrique de l'interface a été faite pour différentes résolutions du maillage du domaine d'étude. La surface de l'interface reste constante quelle que soit la finesse du maillage et n'évolue pas au cours de la transformation géométrique. Le test géométrique effectué est la rotation exacte d'une sphère. Ainsi, plus la résolution du maillage est élevée, plus le nombre d'éléments surfaciques est important. On montre que pour une sphère, le nombre d'éléments surfaciques de celle-ci dépend du nombre d'éléments volumiques du domaine d'étude à la puissance $\frac{2}{3}$. La figure 4.15 illustre l'évolution du logarithme du temps d'exécution moyen d'une itération en fonction du logarithme du nombre de mailles surfaciques de l'interface 4.15(a) et en fonction du logarithme du nombre de mailles volumiques du domaine d'étude 4.15(b). La pente de la courbe représentant l'évolution du logarithme du temps d'exécution en fonction du logarithme du nombre d'éléments surfaciques est quasiment égale à l'unité. Cela prouve que la complexité de l'algorithme est proportionnelle au nombre d'éléments surfaciques.



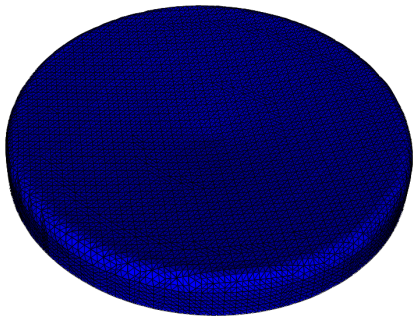
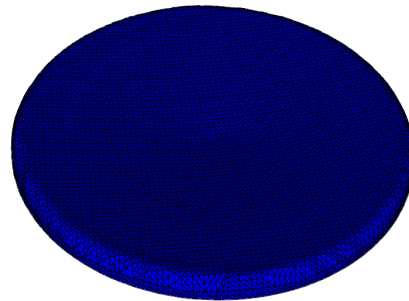
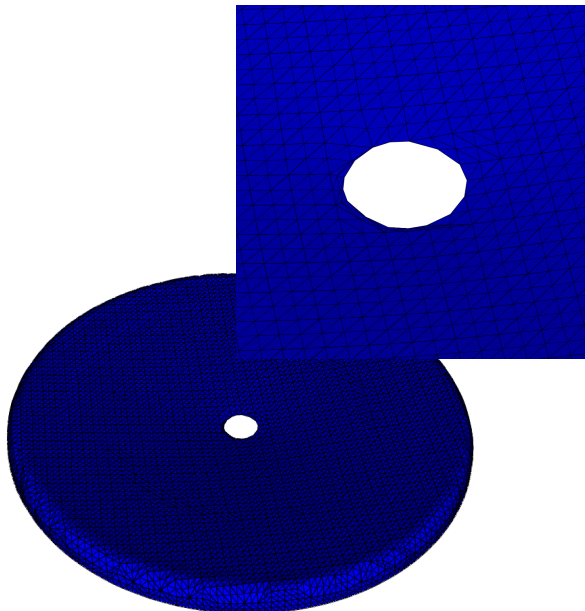
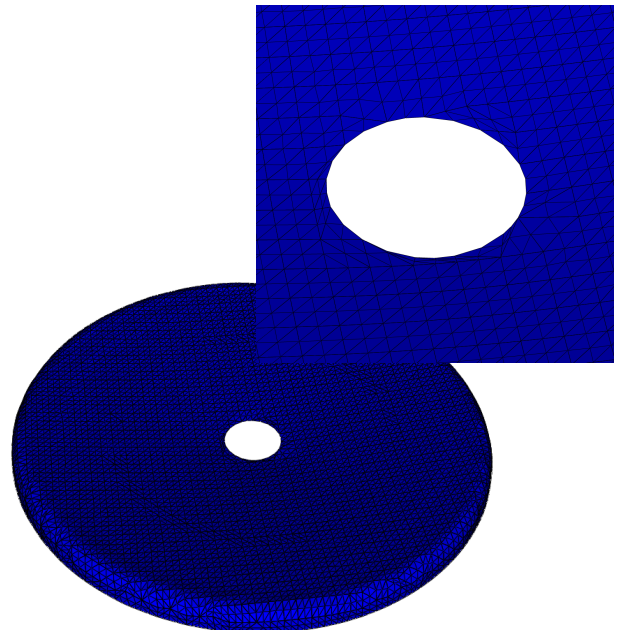
(a) Dépendance du temps d'exécution au nombre d'éléments de surface (b) Dépendance du temps d'exécution au nombre d'éléments de volume

FIGURE 4.15 – Dépendance du temps d'exécution

4.5 Exemple : évaporation d'un film axisymétrique

Nous présentons quelques images illustrant le potentiel de la méthode à simuler le problème axisymétrique de film en évaporation.

L'interface et son déplacement sont purement artificiels. Aucune équation physique n'est résolue. La rupture du film se traduit correctement par une tâche sèche circulaire.

(a) t_0 (b) $t_1 > t_0$ (c) $t_2 > t_1$ (d) $t_3 > t_2$

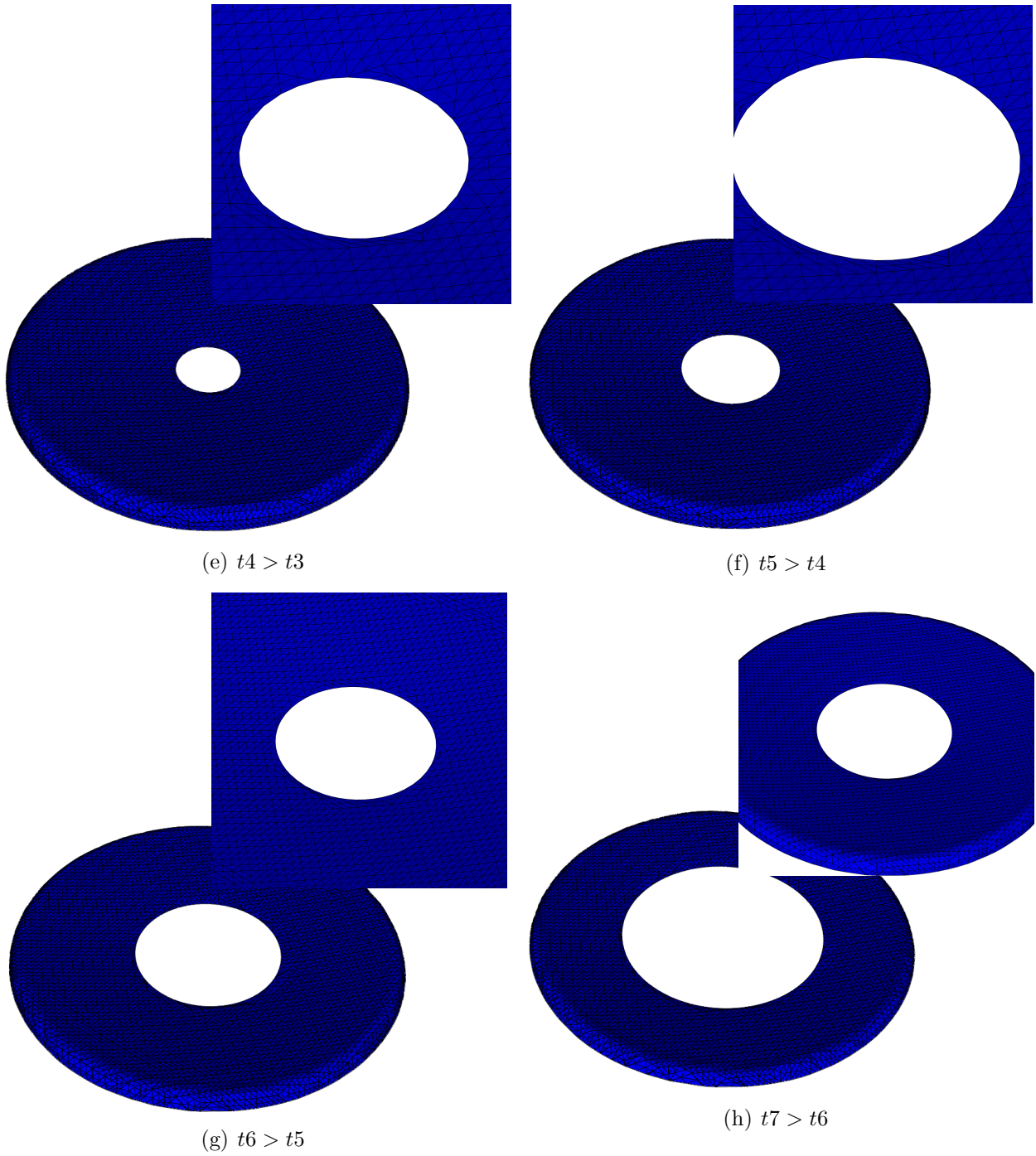


FIGURE 4.16 – Simulation d'évaporation d'une interface axi-symétrique, rupture de l'interface en son centre

4.6 Conclusion

La méthode de suivi d'interface numérique développée constitue une approche originale par rapport aux différentes méthodes existantes. L'interface est toujours constituée par les noeuds du domaine d'étude tout en conservant une répartition régulière des éléments la constituant. Grâce à cette technique, les relations de sauts intervenant aux interfaces se feront naturellement sans le moindre lissage. Ceci devrait optimiser la précision de la simulation. Qui plus est, la méthode présentée est capable de gérer les changements de topologie avec les parois solides ce qui la rend potentiellement très performante pour la description précise des lignes de contact dans le cadre du problème axisymétrique de film en évaporation.

La méthode est conçue pour être parallélisable. Son coût en temps de calcul est faible et dépend du nombre d'éléments de surface constituant l'interface. La précision de la description de l'interface est élevée du fait de la précision de la discrétisation des éléments la composant. Dans le chapitre qui suit nous allons quantifier la précision de la méthode, sa robustesse ainsi que sa capacité à transporter des singularités.

Chapitre 5

Résultats numériques

Sommaire

5.1	Rappels mathématiques	134
5.1.1	Ordre de convergence	134
5.1.2	Définitions des erreurs	134
5.1.3	Définition des normes	135
5.1.4	Calcul des normales et des courbures	135
5.1.5	Calcul de la masse	137
5.2	Test de convergence spatiale	139
5.2.1	Test de rotation d'une sphère sur elle même	139
5.2.2	Test d'aplatissement d'une sphère sur elle même	142
5.3	Test de convergence temporelle	145
5.3.1	Bonne conservation de l'ordre du schéma temporel	145
5.3.2	Comparaison rotation exacte et champ de vitesse rotationnelle avec un schéma temporel de Runge-Kutta	147
5.4	Tests classiques de validation	148
5.4.1	Sphère de Zalesak	148
5.4.2	Test de vorticité d'Enright	151
5.5	Conclusion	155

Dans cette partie, nous allons présenter différents tests permettant de tester de façons quantitative et qualitative la méthode de suivi d'interface. Dans une première partie, nous illustrons les tests de convergence spatiale et temporelle de la méthode. Nous allons démontrer que dans les tests présentés, certains ordres de convergence sont proches de 3, ce qui est l'ordre des éléments utilisés. Dans une seconde partie, nous allons confronter notre méthode aux tests classiques que l'on trouve dans l'état de l'art du suivi d'interface.

5.1 Rappels mathématiques

Les tests de convergence spatiale mettent en évidence l'ordre de convergence de la méthode en regardant l'évolution de l'erreur en fonction de la finesse du maillage.

Les tests de convergence temporelle mettent en évidence l'évolution de l'erreur en fonction du pas de temps. De toute évidence, les résultats relatifs à ce test dépendent du schéma en temps que l'on applique pour l'advection de l'interface.

Les erreurs calculées seront les erreurs sur la position, la normale ainsi que la courbure avant et après une déformation dont la solution exacte est connue. Les erreurs sur la conservation de la masse globale seront également illustrées.

5.1.1 Ordre de convergence

En simulation numérique, les grandeurs numériques sont discrétisées. Par conséquent quel que soit le type d'élément utilisé, on commet obligatoirement une erreur d'interpolation. Cette erreur, notée ϵ , est proportionnelle au pas du maillage Δx à une certaine puissance :

$$\epsilon = \beta \Delta x^\alpha \quad (5.1)$$

où β est une constante et α l'ordre de convergence de la méthode.

En prenant le logarithme de cette expression on obtient l'expression suivante :

$$\log \epsilon = \log \beta + \alpha \log \Delta x \quad (5.2)$$

On trace donc le logarithme de ces normes en fonction du logarithme de la taille de maille. La pente de cette droite donne l'ordre de convergence α de la méthode. Plus l'ordre est élevé, meilleure est la méthode.

5.1.2 Définitions des erreurs

Les erreurs sur la position, la normale et la courbure sont des erreurs permettant de quantifier localement la précision de la méthode. Ces erreurs peuvent être calculées si l'on a une connaissance de la solution théorique. De nombreux tests consistent à appliquer une déformation périodique sur une surface initialement sphérique. A la fin du test, l'interface est théoriquement la même sphère qu'à l'initialisation du test. Dans ce cas de figure, il est facile de connaître les solutions théoriques des différentes erreurs.

L'erreur sur la position est déterminée par la différence entre la distance du point considéré au centre de la sphère et le rayon de celle-ci. On calcule également l'erreur sur la normale et sur la courbure. L'erreur sur la normale est définie comme étant la norme de la différence de la normale calculée avec la normale théorique. L'erreur sur la courbure est calculée par différenciation entre la courbure calculée et la courbure théorique. Dans le cas de la sphère, la courbure théorique est prise comme étant l'inverse du rayon de celle-ci.

Pour certains tests, il est plus délicat d'accéder à une erreur locale. Dans ces cas on parlera d'erreur globale ou intégrée. Il s'agira essentiellement de calculer la masse ou le volume contenu à l'intérieur de l'interface. La connaissance théorique de la masse nous permet de calculer l'erreur commise par la méthode sur cette grandeur intégrée.

5.1.3 Définition des normes

Sur l'espace $C^0([a,b])$ des fonctions continues définies sur un segment $[a,b]$ de \mathbb{R} et à valeurs réelles ou complexes, les normes p sont définies comme suit :

$$\|f\|_p = \left(\int_a^b |f(t)|^p dt \right)^{1/p} \quad (5.3)$$

La norme infinie, ou norme de convergence uniforme s'écrit :

$$\|f\|_\infty = \sup_{t \in [a,b]} |f(t)| \quad (5.4)$$

Par conséquent, on définit l'erreur basée sur la norme L_1 dans le test de rotation d'une sphère de rayon R et de centre C_0 par l'expression suivante :

$$\|err\|_1 = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^n \|X_i - C_0\| - R \right) \quad (5.5)$$

La norme L_2 est définie par :

$$\|err\|_2 = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^n (\|X_i - C_0\| - R)^2} \quad (5.6)$$

La norme L_∞ s'écrit :

$$\|err\|_\infty = \max_{i \in N} \|\|X_i - C_0\| - R\| \quad (5.7)$$

5.1.4 Calcul des normales et des courbures

Afin de calculer les normales et les courbures de chacun des points de l'interface, deux méthodes ont été explorées. Une méthode, très locale, consiste à utiliser les formulations éléments finis donnant accès à la formulation analytique de la différenciation des fonctions de forme. Cependant les éléments finis utilisés sont de classe C^0 . Par conséquent, les tangentes entre éléments ne sont pas continues ce qui laisse parfois apparaître des instabilités. C'est pourquoi une méthode plus globale a été explorée. Cette méthode consiste à déterminer la sphère moindres carrés calculée à partir d'un nuage de points constitué des points de l'élément surfacique et de ses voisins. Cette sphère est alors définie par un centre et un rayon qui permettent de calculer normale et courbure.

5.1.4.1 Formules analytiques de calcul de la normale et de la courbure avec la méthode dite "locale"

Avec cette méthode, la normale est calculée en tout point d'un élément de surface à l'aide de la formule suivante :

$$\vec{n}_i = \sum_j \frac{\partial N_j(\vec{\eta}_i, \xi_i)}{\partial \eta} X_j \wedge \sum_j \frac{\partial N_j(\vec{\eta}_i, \xi_j)}{\partial \xi} X_j \quad (5.8)$$

Les fonctions de formes différenciées des éléments T6 sont données par la table 5.1

$$\lambda = 1 - \xi - \eta \quad (5.9)$$

TABLE 5.1 – Fonctions de formes différenciées d'un élément T6

	$\left\{ \frac{\partial N}{\partial \xi} \right\}$	$\left\{ \frac{\partial N}{\partial \eta} \right\}$
1	$1 - 4\lambda$	$1 - 4\lambda$
2	$4(\lambda - \xi)$	-4ξ
3	$-1 + 4\xi$	0
4	4η	4ξ
5	0	$-1 + 4\eta$
6	-4η	$4(\lambda - \eta)$

Les courbures Γ dans les directions ξ et η , sont calculées avec la formule suivante en remplaçant t par η ou ξ :

$$\Gamma_t = \frac{\|r'(\vec{t}) \wedge r''(\vec{t})\|}{\|r'(\vec{t})\|^3} \quad (5.10)$$

$$\text{où } r'(\vec{t}) = \sum_j \frac{\partial N_j(\eta_i, \xi_i)}{\partial t} X_j \text{ et } r''(\vec{t}) = \frac{\sum_j \frac{\partial N_j(t_i + dt)}{\partial t} X_j - \sum_j \frac{\partial N_j(t_i)}{\partial t} X_j}{dt}$$

t_i correspond aux couples de valeur de (η_i, ξ_i) du point de calcul.

5.1.4.2 Calcul de la normale et de la courbure avec la méthode dite "globale"

On calcule la sphère passant par un nuage de points par approximation moindres carrés. Le nuage de points est constitué par les points définissant le T6 et les points appartenant aux T6 voisins. On est ramené à un système linéaire qui nous donne pour un élément donné le centre et le rayon de la sphère moindres carrés. Le système linéaire est le suivant $AX = B$ avec :

$$A = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i y_i & \sum_{i=1}^n x_i z_i & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i & \sum_{i=1}^n y_i^2 & \sum_{i=1}^n z_i y_i & \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i z_i & \sum_{i=1}^n y_i z_i & \sum_{i=1}^n z_i^2 & \sum_{i=1}^n z_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n y_i & \sum_{i=1}^n z_i & n \end{pmatrix}, B = - \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^3 + x_i y_i^2 + x_i z_i^2 \\ \sum_{i=1}^n y_i^3 + x_i y_i^2 + y_i z_i^2 \\ \sum_{i=1}^n z_i^3 + x_i z_i^2 + y_i z_i^2 \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 \end{pmatrix} \text{ et } X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

"n" est le nombre de points du nuage de points. Pour résoudre ce système, on inverse la matrice A et l'on a directement accès au vecteur X . La connaissance de ce vecteur nous permet de calculer le centre du cercle moindres carrés C_{mc2} et son rayon R_{mc2} par les formules suivantes :

$$C_{mc2} = \left(\frac{-x_1}{2}; \frac{-x_2}{2}; \frac{-x_3}{2} \right) \quad (5.12)$$

$$R_{mc2} = \sqrt{\frac{x_1^2}{4} + \frac{x_2^2}{4} + \frac{x_3^2}{4} - x_4} \quad (5.13)$$

La normale en un point "i" est définie par :

$$\vec{n}_i = \frac{X_i - \vec{C}_{mc2}}{\|X_i - \vec{C}_{mc2}\|} \quad (5.14)$$

La courbure de l'élément sera la même aux six points du T6 et est définie par l'inverse du rayon calculé.

Celle ci est calculée par la formule suivante :

$$\gamma = \frac{1}{R_{mc2}} \quad (5.15)$$

5.1.5 Calcul de la masse

Le calcul de la masse se ramène au calcul du volume contenu à l'intérieur de l'interface. Pour ce faire, nous allons utiliser le théorème mathématique du flux-divergence, aussi appelé le théorème de Green-Ostrogradski. Ce théorème relie la divergence d'un champ vectoriel à la valeur de l'intégrale de surface du flux définie par ce champ. L'expression de ce théorème est la suivante :

$$\int \int \int_{\Omega} \text{div} \vec{F} dV = \int \int_{\Sigma} \vec{F} \cdot d\vec{S} \quad (5.16)$$

où :

Ω représente le volume, et Σ le bord de Ω

$d\vec{S}$ est l'élément de surface dont la normale est dirigée vers l'extérieur.

Ce théorème nous permet de calculer le volume Ω contenu à l'intérieur du contour Σ si on choisit \vec{F} tel que "div $\vec{F} = 1$ ". Pour ce faire, on prend $\vec{F} = \frac{\vec{X}}{3}$, \vec{X} étant les coordonnées du point de calcul.

Ainsi, à l'aide du théorème 5.16 l'expression du volume s'écrit :

$$\Omega = \int \int \int_{\Omega} dV = \int \int_{\Sigma} \frac{\vec{X}}{3} \cdot d\vec{S} \quad (5.17)$$

Grâce à cette formule, nous avons pu exprimer le volume contenu à l'intérieur de l'interface à l'aide d'une intégrale surfacique de la surface de celle-ci. Or cette interface est décomposée en un ensemble fermé de sous éléments finis surfaciques triangulaires. Par conséquent, l'intégrale 5.18 peut s'écrire comme suit :

$$\Omega = \sum_e^{nbElem} \int \int_{\Sigma_e} \frac{\vec{X}}{3} \cdot d\vec{S}_e \quad (5.18)$$

où :

Σ_e est la surface élémentaire et $d\vec{S}_e$ l'élément de surface élémentaire d'un élément fini.

La formulation éléments finis des éléments de surface, nous permet d'utiliser les points et poids de gauss. Cela consiste à remplacer une intégrale continue des valeurs d'une fonction à intégrer sur la surface élémentaire par une somme discontinue des valeurs de cette fonction au point de Gauss affecté par la pondération correspondante appelée "poids de Gauss".

En conclusion, l'expression 5.18 devient :

$$\Omega = \sum_e^{nbElem} \sum_i^{nbPoints} \frac{w_i \vec{X}_i}{3} \cdot \vec{n}_i \quad (5.19)$$

où :

i représente les différents points de Gauss sur l'élément.

w_i la pondération associée au point correspondant.

X_i les coordonnées du point de Gauss i .

\vec{n}_i la normale à l'élément aux coordonnées du point i . Ici la normale est calculée avec les formulations éléments finis.

Afin que cette intégrale numérique soit exacte, nous avons choisi l'intégrale numérique de "Hammer" d'ordre 4 fixant le nombre de points à 6 et dont les valeurs sont données par le tableau 5.2

avec :

$$a = 0.445948490915965$$

TABLE 5.2 – Coordonnées élémentaires et pondérations des points de l'intégrale numérique de Hammer

	ξ	η	w
1	a	a	0.111690794839005
2	$1 - 2a$	a	0.111690794839005
3	a	$1 - 2a$	0.111690794839005
4	b	b	0.054975871827661
5	$1 - 2b$	b	0.054975871827661
6	b	$1 - 2b$	0.054975871827661

$$b = 0.091576213509771$$

5.2 Test de convergence spatiale

5.2.1 Test de rotation d'une sphère sur elle même

Dans ce test, nous appliquons une rotation exacte de l'interface sphérique de telle sorte que celle-ci fasse une révolution en 250 itérations. A la fin du test on regarde l'erreur sur la position, la normale et la courbure par rapport à la sphère théorique. Pour ce faire, on calcule les normes L_1 , et L_∞ des erreurs sur la position, la normale et la courbure.

Dans le cadre du test de rotation d'une sphère sur elle même, le domaine volumique est $[0; 4] * [0; 4] * [0; 4]$. Le centre de la sphère a pour coordonnées $[2,01 \ 2,01 \ 2,01]$, le rayon est

de 0.7 et la matrice de rotation est : $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ avec $\theta = \frac{\pi}{125}$. On fait donc une

révolution en 250 itérations.

5.2.1.1 Résultats des ordres de convergence avec la méthode "locale" du calcul des grandeurs

TABLE 5.3 – Ordre de convergence avec le calcul de la normale et de la courbure par différenciation des fonctions de formes

	L_∞	L_1
Position	2.94	3.1
Normale	1.34	2.3
Courbure	-1.4	0.7

La table 5.3 représente les ordres de convergence de la norme L_1 et L_∞ de l'erreur sur la position, la normale et la courbure par rapport aux valeurs théoriques. La figure 5.1 représente les courbes de convergence de ces grandeurs en fonction du logarithme de la taille de maille. On constate que les ordres de convergence sont plutôt satisfaisants à l'exception de l'erreur "max", L_∞ , commise sur la courbure dont l'ordre de convergence est négatif ce qui revient à avoir une erreur croissante avec la taille de maille. Cependant l'erreur moyenne, L_1 , commise sur la courbure reste satisfaisante avec un ordre de convergence de 0,7.

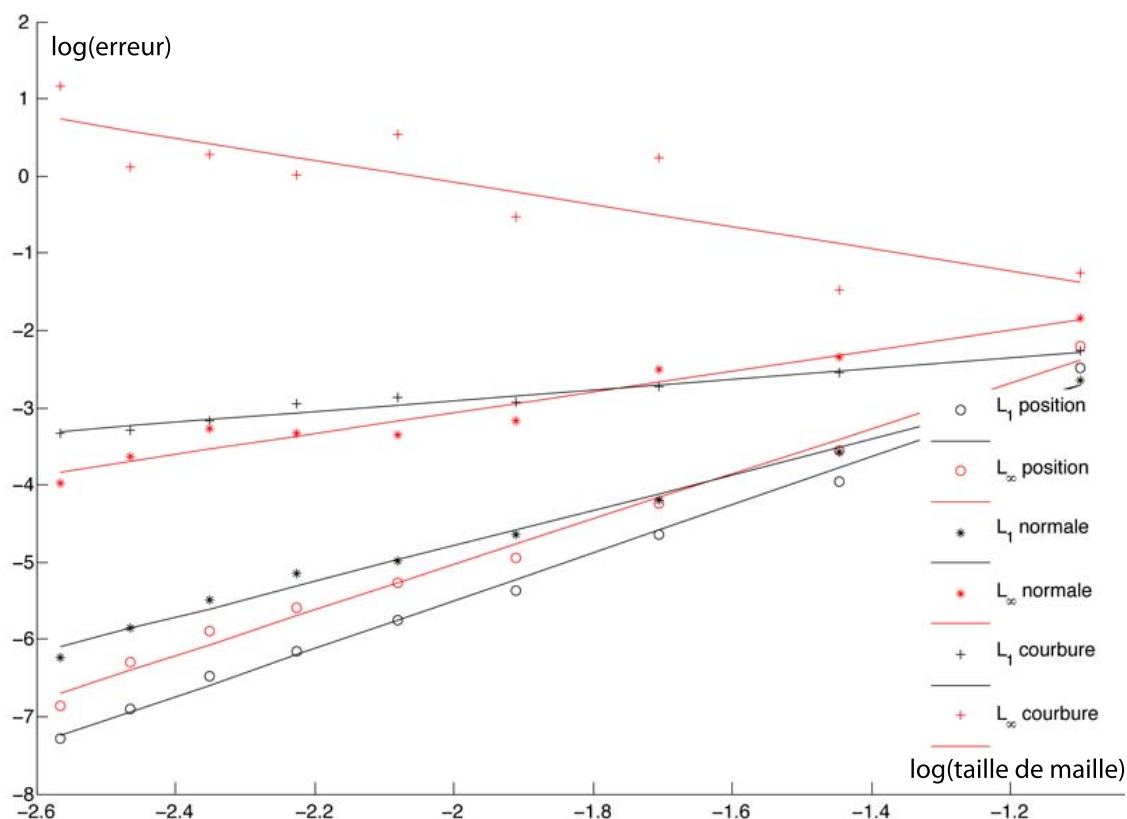


FIGURE 5.1 – Convergence du maillage méthode 1

5.2.1.2 Résultats avec la méthode "globale" :

TABLE 5.4 – Ordre de convergence avec le calcul de la normale et de la courbure par calcul de la sphère moindres carrés

	L_∞	L_1
Position	2.95	3.1
Normale	2.3	2.66
Courbure	1.72	2.11

La table 5.4 illustre les ordres de convergence obtenus avec cette méthode. La figure 5.2 montre les courbes de convergences.

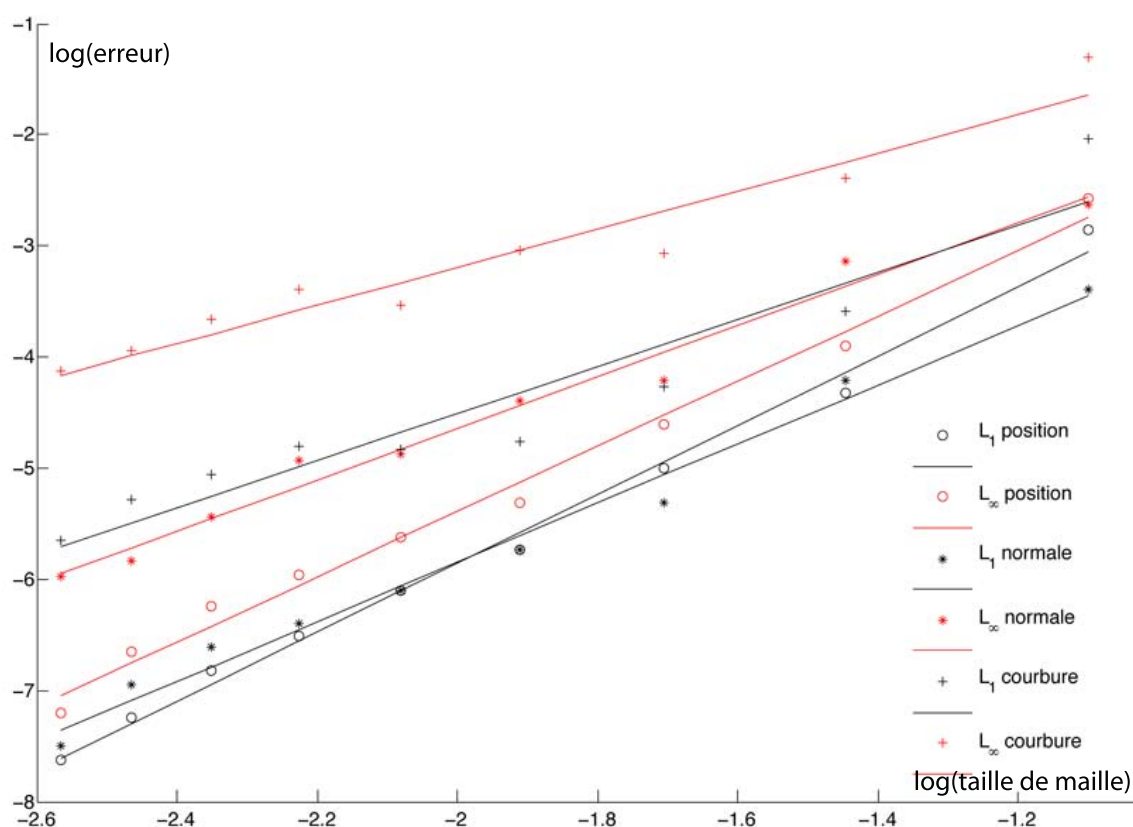


FIGURE 5.2 – Convergence du maillage méthode 2

La comparaison de la méthode "locale" avec la méthode "globale" sur le calcul des normales et des courbures nous amène à conclure que la méthode "globale" permet de lisser les erreurs dues aux discontinuités des normales aux frontières des éléments de surfaces. Ainsi, avec la méthode "globale" utilisant l'interpolation d'une sphère moindres carrés, la précision sur ces grandeurs est meilleur et permet d'obtenir des ordres de convergence très satisfaisants.

5.2.2 Test d'aplatissement d'une sphère sur elle même

Le test suivant consiste en l'étalement d'une sphère sur elle même. Il est défini par le champs de vitesse suivant :

$$u(t) = ax \cos(\pi \frac{t}{T}) \quad (5.20)$$

$$v(t) = ay \cos(\pi \frac{t}{T}) \quad (5.21)$$

$$w(t) = -bz \cos(\pi \frac{t}{T}) \quad (5.22)$$

Ce champ de vitesse a la particularité d'être à divergence nulle si $a = \frac{b}{2}$. Cela implique que le volume de la sphère doit rester constant au cours du test, on tachera de vérifier cela. Ce test est périodique. Ainsi au bout d'une période, l'interface est censée revenir dans sa position et forme initiale et l'on doit retrouver la sphère initiale. Les lignes de courant déduites de ce champs de vitesse sont les suivantes :

$$x(t^n) = \exp(a\Delta t \cos(\pi \frac{t}{T}))x(t^{n-1}) \quad (5.23)$$

$$y(t^n) = \exp(a\Delta t \cos(\pi \frac{t}{T}))y(t^{n-1}) \quad (5.24)$$

$$z(t^n) = \exp(-b\Delta t \cos(\pi \frac{t}{T}))z(t^{n-1}) \quad (5.25)$$

Tout comme dans le test de rotation de la sphère sur elle-même, on impose aux points de l'interface les lignes de courants déduites du champs de vitesse afin de ne pas générer d'erreur due à la diffusion numérique par l'étape d'advection.

Dans le test présenté, la sphère a un rayon de 0,7, est centrée en [1,01 1,01 2,01]. Le domaine d'étude est $[0; 4] * [0; 4] * [0; 4]$. $T = 20$ et $a = 0, 1$, $b = 0, 2$. Les normales et courbures sont calculées à l'aide de la méthode de la sphère moindres carrés.

TABLE 5.5 – Ordre de convergence avec le calcul de la normale et de la courbure par calcul de la sphère moindres carrés

	L_∞	L_1
Position	2.6	2.85
Normale	1.8	2.19
Courbure	1.01	1.6

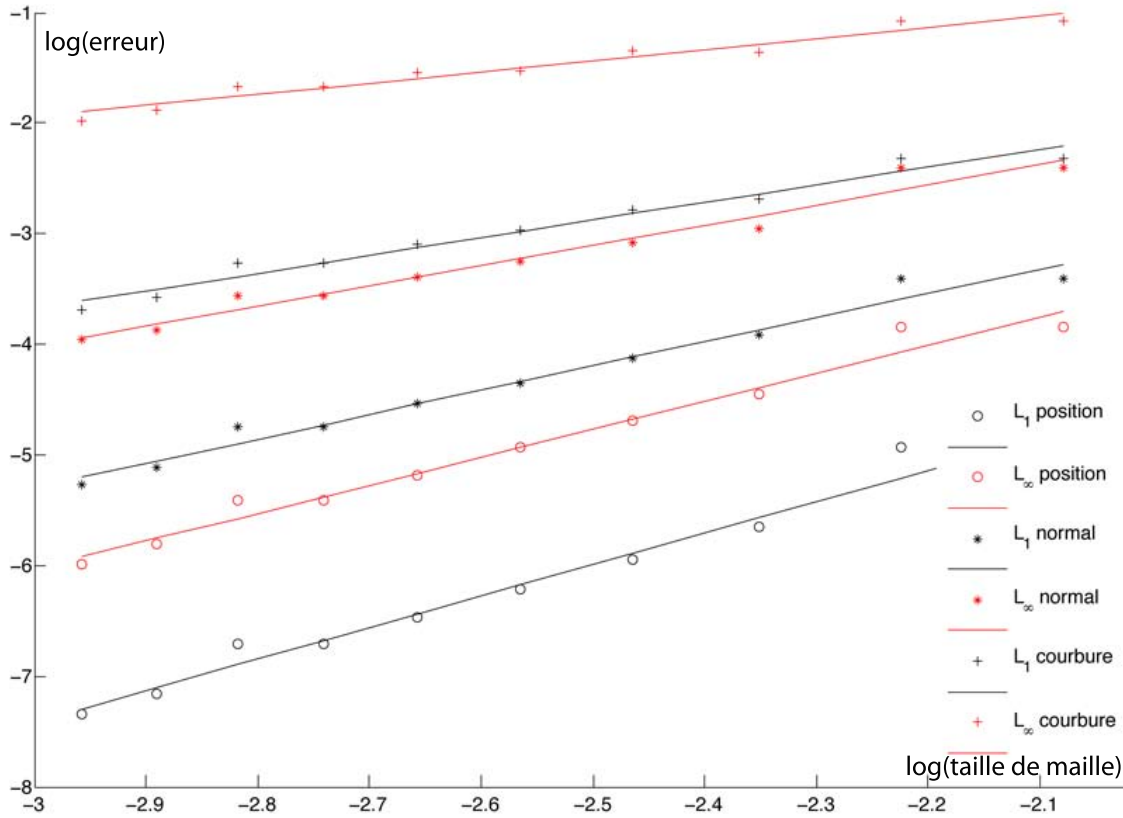


FIGURE 5.3 – Convergence du maillage test d'aplatissement d'une sphère

La table 5.5 illustre les ordres de convergence obtenues. La figure 5.3 montre les courbes de convergence.

Les ordres de convergence obtenus sont encore très satisfaisants avec encore un ordre de convergence proche de 3 pour la position et des ordres plus que satisfaisants pour la normale et la courbure.

Afin de mettre en évidence le côté conservatif de la méthode, nous allons tracer l'évolution du volume délimité par l'interface. Le champ de vitesse étant à divergence nulle, le volume délimité par l'interface devrait rester constant au cours de la transformation géométrique appliquée à l'interface. La conservation du volume peut être directement reliée à la conservation de la masse dans le cadre d'un calcul physique. La figure 5.4 illustre l'interface dans ses formes extrêmes. Tant que $t < \frac{T}{2}$ la sphère s'aplatit dans une direction et s'étale dans l'autre, se transformant ainsi en ellipsoïde puis en "pastille". Quand $t > \frac{T}{2}$, le champ de vitesse étant périodique, la transformation inverse s'applique pour revenir à une forme quasi sphérique. La courbe 5.5 illustre la perte de masse au cours de la transformation. L'axe des ordonnées exprime la perte de masse en pourcentage. On constate que malgré la forte déformation appliquée à l'interface, l'algorithme conserve la masse avec une erreur finale relative de 0,35% par rapport à la masse initiale. Le nombre d'itérations pour ce test est de

400. Ce test illustre la bonne capacité de la méthode à conserver la masse en cas de grande déformation.

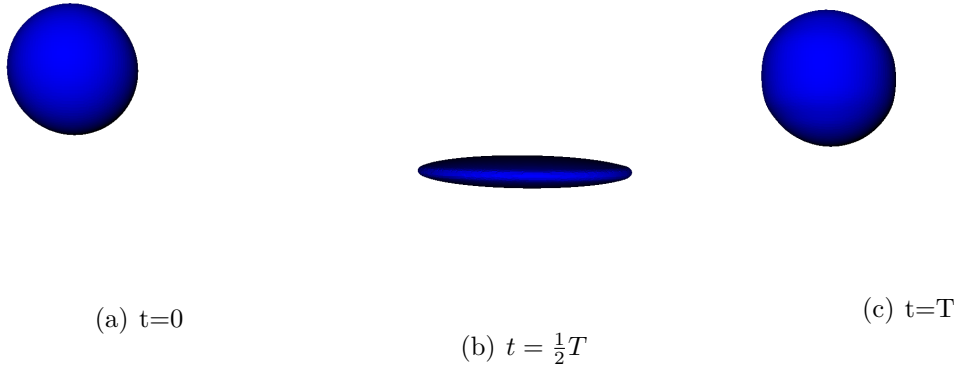


FIGURE 5.4 – Evolution de l'interface dans le test d'aplatissement de la sphère

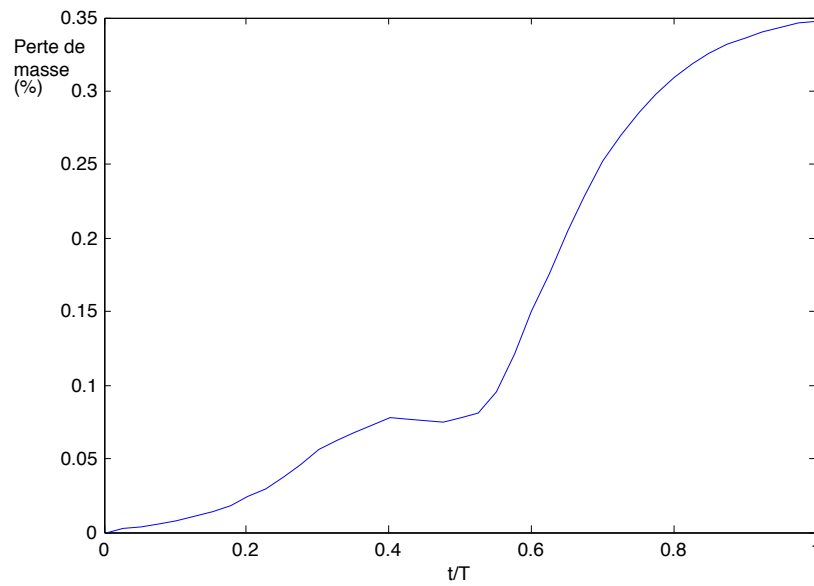


FIGURE 5.5 – Evolution de l'erreur sur la masse au cours de la transformation

5.3 Test de convergence temporelle

5.3.1 Bonne conservation de l'ordre du schéma temporel

Les tests de convergence temporelle permettent de voir si la méthode de suivi d'interface dégrade ou pas le schéma en temps utilisé. Nous allons soumettre la méthode à un test où l'interface est advectée par schéma d'Euler progressif dans un champs rotationnel. Le domaine d'étude est $[0; 4] * [0; 4] * [0; 4]$ et possède 37 éléments volumiques par côté. Initialement, l'interface est une sphère de rayon 0,7 centrée en $[2,01 \ 2,01 \ 2,01]$. Le champs de vitesse suivant consiste en la rotation de l'interface de façon légèrement décentrée par rapport au centre de la sphère initiale.

$$u(t) = 0 \quad (5.26)$$

$$v(t) = -(z - 2,01) \quad (5.27)$$

$$w(t) = y - 1,81 \quad (5.28)$$

Le schéma d'euler progressif est défini par l'équation suivante :

$$\vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^n) + dt\vec{U}(t^n) \quad (5.29)$$

Après une révolution, l'interface est censée revenir dans sa position initiale. Par conséquent l'erreur est donc calculée par rapport aux paramètres de la sphère initiale (rayon et centre initiale). Les différents pas de temps utilisés sont définis dans le tableau 5.6. Plus le pas de temps diminue, plus le nombre d'itérations nécessaires afin de faire une révolution augmente donc plus on cumule les erreurs. Cependant, malgré cela, on montre qu'un tel schéma doit satisfaire un ordre de convergence proche de 1 en fonction du pas de temps.

TABLE 5.6 – Equivalence pas de temps nombre d'itérations pour une révolution

dT	N
0,0125	80
0,01	100
0,00625	160
0,005	200
$\frac{1}{40}$	240

Les ordres de convergence obtenus sont de 0,71 pour l'erreur moyenne (norme 1) sur la position et sur la courbure et de 0,9 sur la normale. La figure 5.6 illustre visuellement la diminution de l'erreur lorsque le pas de temps diminue. Le maillage avant et après la révolution est représenté pour un pas de temps de $\frac{1}{80}$ figure 5.6(a) et de $\frac{1}{240}$ figure 5.6(b).

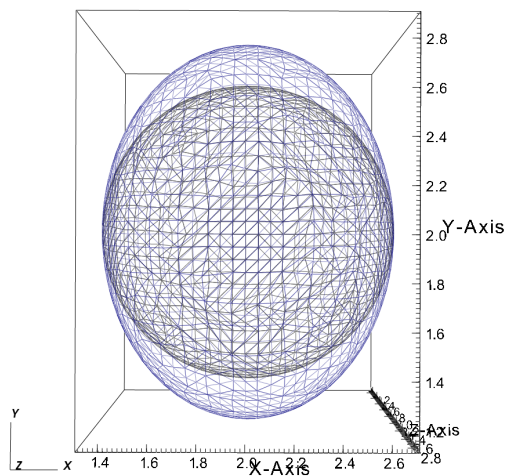
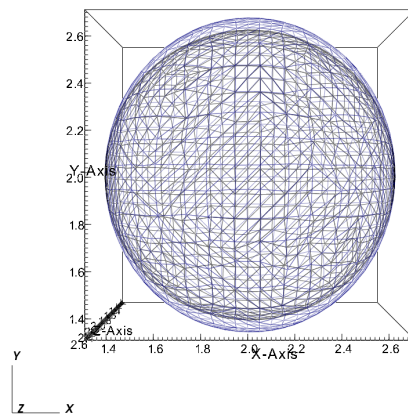
(a) $dt = \frac{1}{80}$ (b) $dt = \frac{1}{240}$

FIGURE 5.6 – Erreur commise sur les éléments d'interface avec un schéma temporel d'ordre 1

5.3.2 Comparaison rotation exacte et champ de vitesse rotationnelle avec un schéma temporel de Runge-Kutta

Dans ce test, nous allons comparer les erreurs commises sur l'advection de l'interface en fonction du schéma en temps utilisé. Pour un même cas test consistant en la rotation d'une sphère sur elle même, nous allons comparer l'erreur sur la masse ainsi que les normes 1 et infinie de l'erreur sur la position, faite, après une révolution dans le cadre d'une rotation exacte à l'aide de la matrice de rotation 5.2.1 puis dans le cadre d'un champ de vitesse rotationnel et de différents schémas temporels définis comme suit :

5.3.2.1 Euler explicite ou ordre 1 :

$$\vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^n) + dt\vec{U}(t^n) \quad (5.30)$$

5.3.2.2 Runge-Kutta à l'ordre 2 :

$$\vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^n) + dt\vec{U}\left(t^n + \frac{dt}{2}, \vec{X}(t^n) + \frac{dt}{2}\vec{U}(t^n, \vec{X}(t^n))\right) \quad (5.31)$$

5.3.2.3 Runge-Kutta à l'ordre 4 :

$$\vec{X}(t^{n+1}) = \vec{X}(t^n) + \frac{dt}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (5.32)$$

où :

$$k_1 = \vec{U}\left(t^n, \vec{X}(t^n)\right)$$

$$k_2 = \vec{U}\left(t^n + \frac{dt}{2}, \vec{X}(t^n) + \frac{dt}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = \vec{U}\left(t^n + \frac{dt}{2}, \vec{X}(t^n) + \frac{dt}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = \vec{U}\left(t^n + dt, \vec{X}(t^n) + dtk_3\right)$$

La sphère de rayon 0,7 est placée dans un domaine d'étude de $[0; 4] * [0; 4] * [0; 4]$ et centrée en $[2,01 \ 2,01 \ 2,01]$. Le nombre d'éléments par côté du domaine est de 37, ceci implique qu'il y a 13 éléments dans le diamètre principal de la sphère. La table 5.7 montre que le schéma d'euler progressif à l'ordre 1 génère une erreur non négligeable, cependant un schéma de Runge-Kutta à l'ordre 2 donne des résultats très proches de ceux obtenus dans le cadre d'une rotation exacte. Bien que le schéma de Runge-Kutta à l'ordre 4 sera souvent utilisé dans les tests suivants, la précision du schéma d'ordre 2 est suffisante et très satisfaisante.

TABLE 5.7 – Erreurs relatives selon les schémas temporels

Type de schéma	Rotation exact	Euler Ordre 1	RK ordre 2	RK ordre 4
Perte de masse	$6,763e^{-3}$	$1,645e^{-1}$	$6,756e^{-3}$	$6,778e^{-3}$
Position norme 1	$2,1450e^{-3}$	$5,2639e^{-2}$	$2,1421e^{-3}$	$2,1497e^{-3}$
Position norme ∞	$3,8174e^{-3}$	$8,0146e^{-2}$	$3,7932e^{-3}$	$3,8205e^{-3}$

5.4 Tests classiques de validation

Dans la littérature, on trouve de nombreux cas tests permettant de juger la fiabilité d'une méthode de suivi d'interface. Parmi ces tests, deux classiques reviennent fréquemment.

Le test de la sphère de Zalesak consiste en la rotation d'une sphère possédant un alésage en son centre. Cet alésage crée des singularités anguleuses. Ce test met en exergue la capacité de la méthode à transporter des singularités.

Le test de vorticit   d'Enright [Enright et al. \(2002\)](#) (Tache cisail  e par un champs tournant p  riodique dans un   coulement diphasique 3D) teste la capacit   de la m  thode    conserver le volume dans le cadre de tr  s grandes d  formations. Pour ce faire, une interface initialement sph  rique est plac  e dans un champs de vitesse    divergence nulle. Par cons  quent, le volume contenu    l'int  rieur de l'interface doit rester constant tout au long de la transformation. De plus ce champs de vitesse   tant p  riodique, l'interface est cens  e revenir dans sa forme initiale    la fin du test.

5.4.1 Sph  re de Zalesak

Ce test consiste en la rotation d'une interface sph  rique poss  dant un al  sage cr  ant ainsi une forte singularit   anguleuse figure [5.7](#).

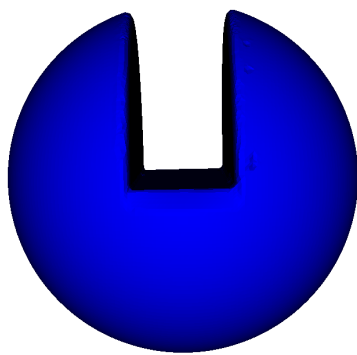
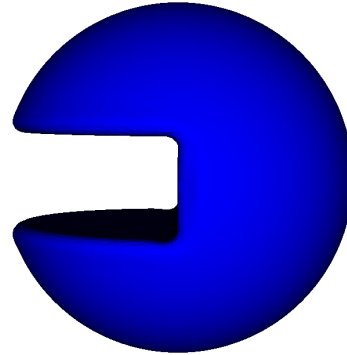
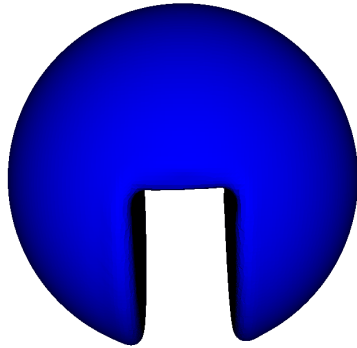
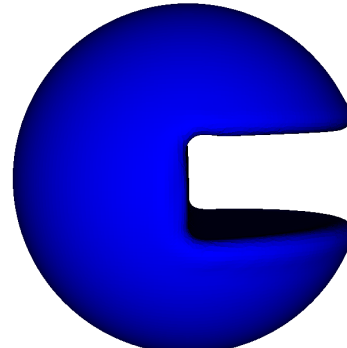
(a) t_0 (b) $t_1 > t_0$ (c) $t_2 > t_1$ (d) $t_3 > t_2$

FIGURE 5.7 – Test de Zalesak : différentes étapes

L'objectif de ce test est de tester la capacité de la méthode de suivi d'interface à transporter cette singularité. Moins la singularité est lissée meilleure est la méthode. Cette aspect sera testé uniquement de façon qualitative. Une étude de conservation de la masse sera faite afin de quantifier l'ordre de convergence de la méthode sur ce test. En effet, plus la singularité est lissée, plus on perd du volume.

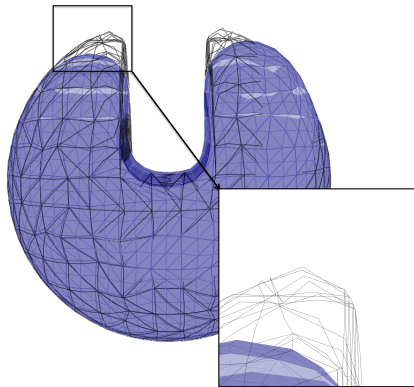
Le domaine d'étude est $[0; 4] * [0; 4] * [0; 4]$. L'interface est initialement centrée en $[2,01 \ 2,01 \ 2,01]$ placé dans le champs de vitesse rotatif suivant :

$$u(t) = 0 \quad (5.33)$$

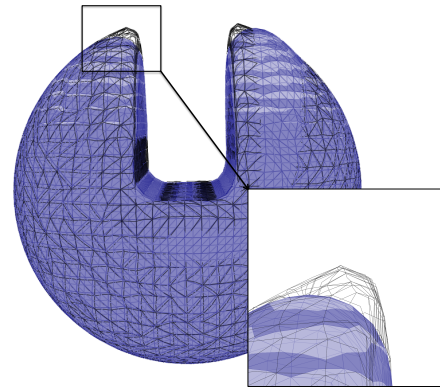
$$v(t) = -(z - 2,01) \quad (5.34)$$

$$w(t) = y - 2,01 \quad (5.35)$$

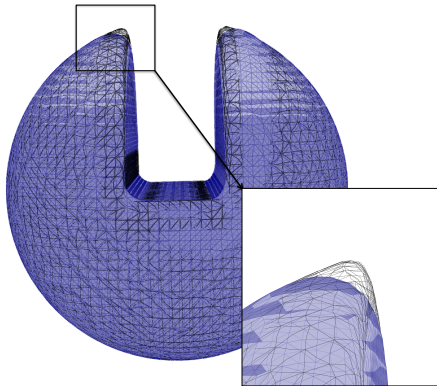
Le schéma en temps utilisé est un schéma de Runge-Kutta à l'ordre 4. Le pas de temps est calculé de pour faire une révolution en 250 itérations. Par conséquent, $\Delta t = \frac{2\pi}{250}$. La figure 5.8 représente l'interface avant la révolution (maillage noir) et l'interface après une révolution (maillage bleu) pour différentes tailles de mailles.



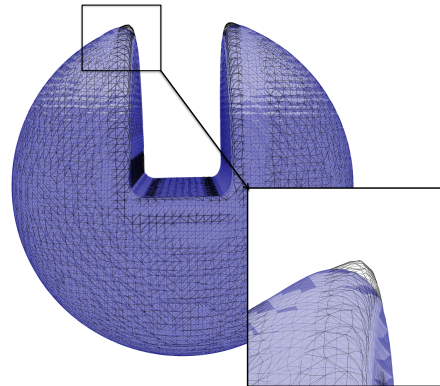
(a) 12 éléments volumiques dans le diamètre de la sphère



(b) 25 éléments volumiques dans le diamètre de la sphère



(c) 37 éléments volumiques dans le diamètre de la sphère



(d) 50 éléments volumiques dans le diamètre de la sphère

FIGURE 5.8 – Sphère de Zalesak avant et après une révolution

La figure 5.8 montre que plus la sphère est précisément résolue, plus la singularité est préservée. L'ordre de convergence spatiale sur la conservation de la masse est de 2,7. La table 5.8 illustre les erreurs relatives faites sur la masse par rapport à la masse du volume contenue à l'intérieur de la sphère avant la révolution (représenté par le maillage noir sur la figure 5.8) et après la révolution (maillage bleu sur la figure 5.8).

TABLE 5.8 – Test de Zalesak : erreur sur la masse

Nombre d'éléments dans le diamètre de la sphère	12	25	37	50
Perte de masse relative en %	3,8	0,64	0,21	0,095

5.4.2 Test de vorticité d'Enright

Pour ce test, le domaine d'étude est $[0; 1] * [0; 1] * [0; 1]$. L'interface est initialement une sphère de rayon 0,15 centrée en $[0,35 \ 0,35 \ 0,35]$. Celle-ci est placée dans un champ de vitesse $2T$ périodique dont la forme analytique est la suivante :

$$u(x, y, z) = 2 \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \quad (5.36)$$

$$v(x, y, z) = -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \sin(2\pi z) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \quad (5.37)$$

$$w(x, y, z) = -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi z) \sin(2\pi y) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \quad (5.38)$$

Ce cas est très intéressant, il permet de tester à la fois l'erreur commise de façon globale sur la conservation de la masse et locale sur la position :

- De façon globale car le champ de vitesse étant à divergence nulle, le volume doit rester constant.
- De façon locale sur la position car, le test étant périodique, l'interface est censée retrouver sa forme initiale.

La figure 5.9 représente les différentes formes prises par l'interface au cours de la transformation.

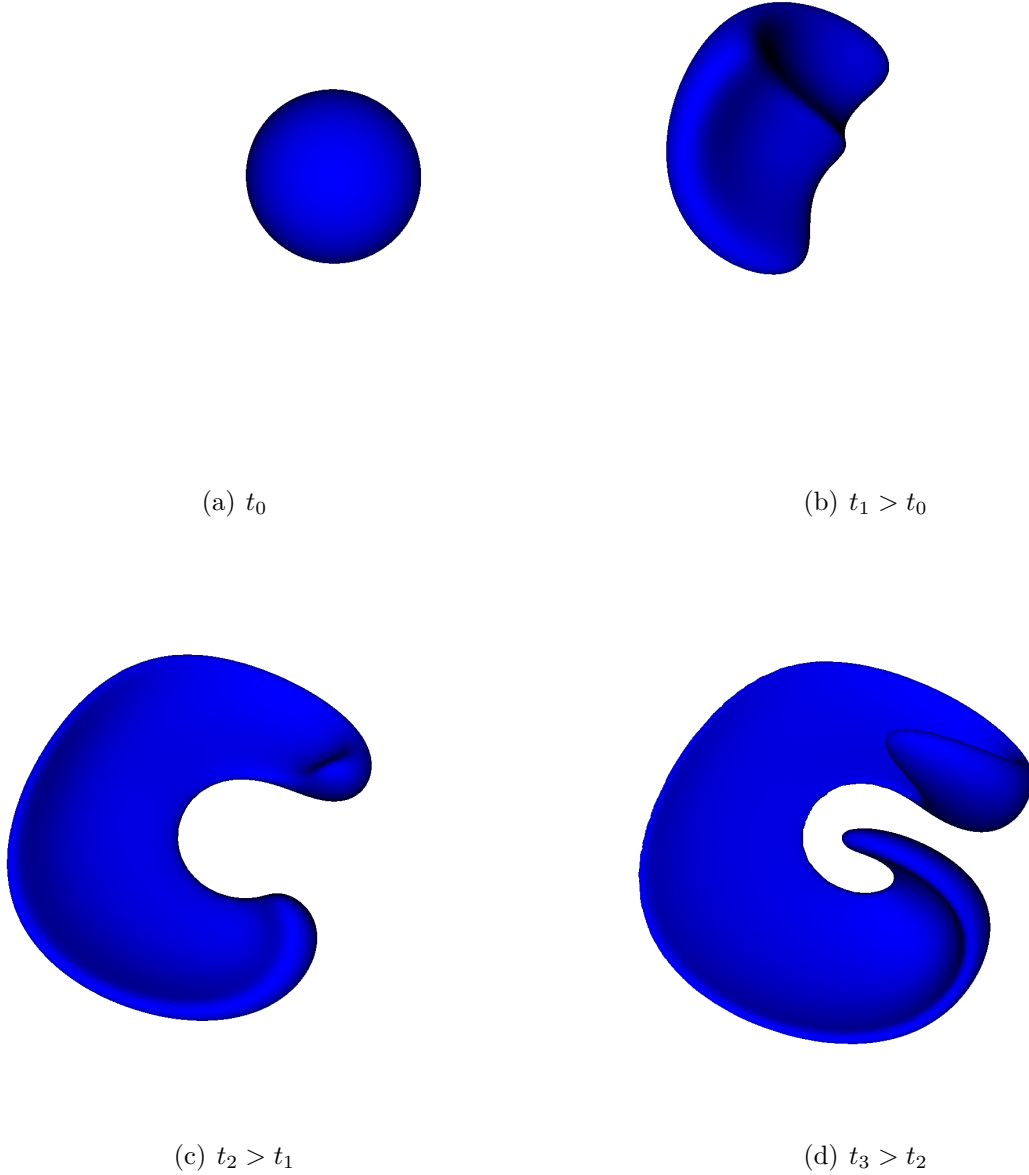


FIGURE 5.9 – Test de vorticit  d'Enright : 128  l ments par c t 

Plus la p riode " T " est grande, (g n ralement prise  gale   3), plus la d formation et le cisaillement de la sph re est important   tel point que son  paisseur devient extr mement fine quand la d formation est maximum, pour $t = \frac{T}{2}$.

La m thode de suivi d'interface pr sent e n'est pas capable de conserver des d tails relatifs   l'interface dont la finesse est inf rieure   la taille de maille. Ainsi, si l' paisseur de l'interface devient inf rieure   la taille de maille, l'interface est perdue. Or une p riode $T = 3$ n cessite un maillage dont la r solution est sup rieure   128^3  l ments volumiques. Cela devient tr s

coûteux en mémoire et c'est pourquoi pour l'étude de convergence de ce test nous avons fixé la période à $T = 2$. Le pas de temps est fixé et égal à $\delta t = 1e - 3$ le nombre d'advections est de 2000. Le schéma en temps utilisé est un schéma de Runge-Kutta à l'ordre 4. Cette simulation a été faite pour des résolutions du domaine allant de 27^3 à 87^3 éléments volumiques par côté. Pour une résolution de 27^3 éléments, le test ne passe pas. Il faut une résolution de 47^3 éléments par côté. Les figures 5.10(a) et 5.11(a) représentent la superposition de l'interface au temps $t = 0$ avec celle au temps $t = T$ pour un maillage de 47^3 et 87^3 éléments volumiques. Les figures 5.10(b) et 5.11(b) représentent la forme de l'interface au maximum de déformation, c'est à dire au temps $t = \frac{T}{2}$ pour une résolution de respectivement, 47^3 et 87^3 éléments volumiques.

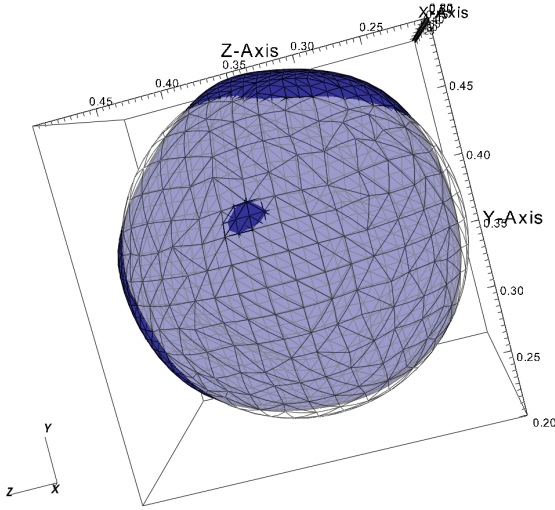
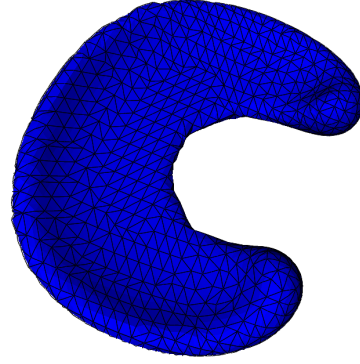
(a) $t = 0$ et $t = T$ (b) $t = \frac{T}{2}$

FIGURE 5.10 – Test de vorticité d’Enright : 47 éléments par côté

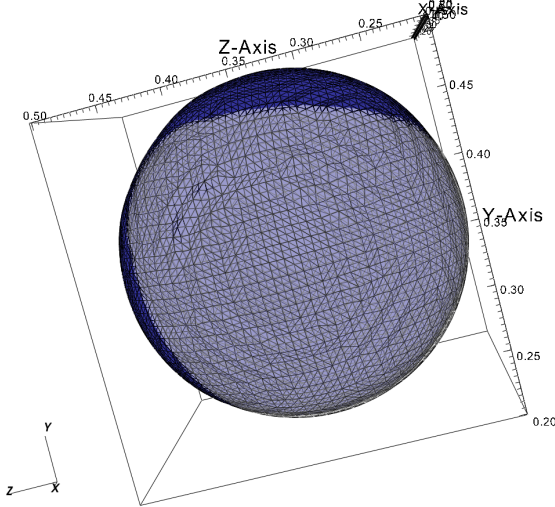
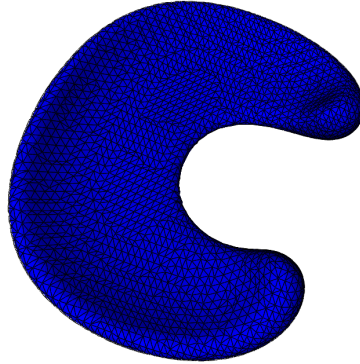
(a) $t = 0$ et $t = T$ (b) $t = \frac{T}{2}$

FIGURE 5.11 – Test de vorticité d’Enright : 87 éléments par côté

De façon plus quantitative, la figure 5.12(b) représente l’évolution de l’erreur relative faite sur la masse au cours de la transformation pour différentes résolutions. Avec un maillage sous-résolu de 47 éléments par côté, la perte de masse approxime les 7%. Avec un maillage d’une résolution ”quasi” deux fois supérieure, la perte de masse est inférieure à 1%. Les ordres de convergence des différentes erreurs sont données sur la figure 5.12(b). On notera que l’on retrouve un ordre de convergence proche de 3 pour l’erreur commise sur la perte de

masse et sur la position.

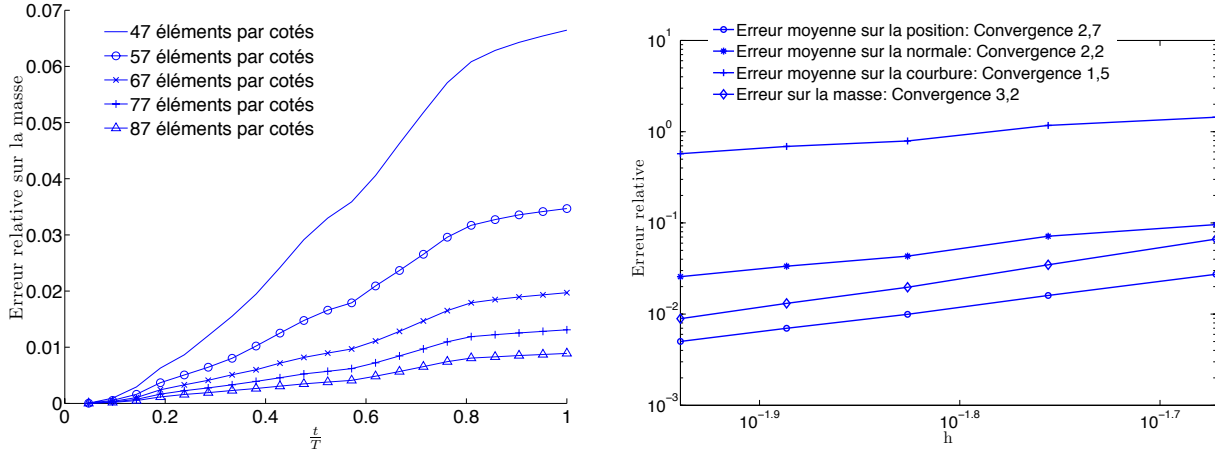


FIGURE 5.12 – Etude des erreurs dues à la méthode sur le test de vorticité d'Enright

5.5 Conclusion

En conclusion, les différents tests effectués ont montré une bonne précision générale de la méthode développée. Un ordre de convergence proche de 3 est vérifié sur la conservation de la masse ainsi que sur la position de l'interface. La méthode s'est également montrée robuste face aux grandes déformations et sa capacité à transporter des singularités a été validée. Toutefois la méthode n'est actuellement pas capable de décrire des interfaces dont la résolution est inférieure à la taille de maille. La connexion et fragmentation d'interface, nécessitant des changements de topologie des interfaces, est en projet.

Conclusion générale et perspectives

Les objectifs de ce travail consistaient à mettre en place une expérience appropriée à l'étude des films en évaporation, de leurs ruptures et à développer des outils numériques et expérimentaux relatifs à cette étude. Au terme de ce mémoire qui expose les différents travaux, nous récapitulons les points forts de ce travail :

Expérience mise en place

L'expérience mise en place permet l'exploration de l'évaporation d'un film liquide, de sa rupture et d'un processus de démouillage évaporatif en présence de ligne triple active. Cette expérience propose l'étude séquentielle de ces trois phénomènes dont le couplage avec une approche numérique est en cours de développement. Durant le processus d'évaporation, les formes de l'interface, sa vitesse de descente ainsi que l'évolution de l'angle de contact et la vitesse de la ligne triple ont été mesurés. Une première quantification des densités de flux et des effets de lignes triples a également été faite.

L'intégration de ces données expérimentales dans les simulations numériques commence à donner des résultats pertinents dans le cadre de modélisations axisymétriques en deux dimensions.

Les premiers résultats expérimentaux ont également permis de montrer que pour une certaine épaisseur de substrat, la conductivité ne semble pas jouer un rôle moteur dans le processus d'évaporation du film liquide. Ces résultats ont aussi illustré que l'épaisseur du substrat peut être un paramètre signifiant sur la cinétique d'évaporation et que celle-ci peut influencer sur la forme de la zone sèche au moment de la rupture du film.

Outils développés

Deux outils principaux ont été développés :

- Un outil intervenant dans le cadre de la modélisation numérique des problèmes à changement de phase permettant de suivre une interface séparant différentes phases.
- Un outil expérimental permettant la mesure du profil d'une interface au voisinage de la ligne triple, ainsi que l'angle de contact et la position de celle-ci au cours du temps.

Méthode de suivi d'interface numérique tridimensionnelle

La méthode de suivi d'interface infiniment fine a été développée en trois dimensions d'espace. La particularité de cette méthode est que l'interface est toujours constituée par les faces des éléments volumiques du domaine d'étude ce qui rend l'interface infiniment fine et empêche toute diffusion numérique de celle-ci. Les propriétés physiques des interfaces peuvent être naturellement appliquées sans perte de précision et la géométrie des interfaces, plus particulièrement au voisinage des lignes de contacts, peut être rigoureusement respectée.

La méthode présentée est apte à traiter les changements de topologies dans le cadre d'interactions avec des parois solides ce qui la rend potentiellement très performante pour l'étude

des films évaporatifs, de leur rupture et des problèmes d'ébullition (croissance de bulles). Les différents tests réalisés ont montré l'ordre de convergence élevée de la méthode sur différents critères tels que la position spatiale, la courbure de l'interface et la conservation du volume délimité par l'interface. L'aspect robuste de la méthode a été mis en avant lors de test soumettant l'interface à de fortes déformations où la courbure locale peut être très importante. La description élémentaire des différents algorithmes intervenant dans la méthode proposée fait que l'intégration de celle-ci dans une structure de programmation parallèle n'est pas un obstacle. De plus, nous avons montré que le coût en temps de calcul a une dépendance quasi linéaire avec le nombre d'éléments de l'interface et n'est pas directement corrélé avec le nombre d'éléments en volume.

Méthode de mesure du profil d'une interface au voisinage d'une ligne de contact

Une technique d'inversion optique a été développée dans le but de mesurer le profil de l'interface au voisinage de la ligne triple, l'angle de contact et la position de celle-ci. Cette méthode exploite les lois de l'optique géométrique afin de comprendre comment la réfraction d'une nappe laser peut influencer sur l'intensité lumineuse de celle-ci. La particularité de cette méthode est de ne pas nécessiter de visualisation par le côté du profil que l'on souhaite mesurer. Une visualisation de côté étant impossible dans le cadre de problème axisymétrique de film en évaporation car ceux-ci prennent une forme concave, cette technique s'avère pertinente pour ce type d'étude. Le domaine privilégié d'application pour la mesure d'angle de contact, situé entre 2° et 40° , est complémentaire des différentes techniques de notre connaissance. La technique a montré une précision de l'ordre de $2.10^{-5} m$ sur le profil de l'interface et inférieure à 1° sur la mesure d'angle de contact pour un ménisque en verre.

Perspectives

Les perspectives de ces travaux sont d'ordres expérimentales et numériques.

Sur le plan numérique, la méthode de suivi d'interface mise en place s'est avérée plus robuste que prévu. C'est pourquoi la gestion des changements de topologie des interfaces fluides est en projet. Ceci permettrait de reproduire les phénomènes de coalescences et de fragmentations des phases. Cela donnerait un champ d'application assez vaste à l'étude des problèmes diphasiques. L'extension en trois dimensions de la résolution des équations de conservation est de toute évidence une des principales priorités. L'intégration de conditions limites aux interfaces et à la ligne triple, obtenues à partir d'expériences ou de modèles de sous-maillages, pourra alors simuler avec un certain réalisme ces problèmes compte tenu de la précision sur la description géométrique de la méthode de suivi d'interface développée.

D'un point de vue expérimental, l'analyse thermique de l'expérience du problème axisymétrique de film en évaporation est à approfondir. En effet, les effets thermiques relatifs à la ligne triple ont été mis en évidence toutefois, une quantification plus précise s'impose et la validation des hypothèses sur lesquelles cette quantification repose est nécessaire. Dans ce

but, des analyses thermiques à l'aide de caméra infra-rouge sont en projet. L'idée consiste à utiliser un substrat en silicium oxydé. Le processus d'évaporation serait filmé par dessous. Ce substrat offrirait la mesure de la température de la face supérieure du substrat et donc la température de ligne triple. De façon générale, il permettrait également d'avoir une bonne cartographie thermique de la face supérieure du substrat.

Afin d'étudier avec plus de précisions les mécanismes de rupture de film liquide, une technique d'interférométrie est en cours de développement. Celle-ci permettrait la mesure de la géométrie du film liquide au moment de sa rupture à des échelles microscopiques.

Annexes

.1 Algorithme de traitement d'images pour la détection de la position de la ligne triple

Le but de l'algorithme de traitement d'images est de détecter sur des images infra-rouges ou visibles, le rayon et le centre du disque représentant la zone sèche. A l'image de la figure 3.1, on voit que la zone sèche au centre du puits d'évaporation se distingue très nettement par une couleur différente de la zone de fluide. L'idée de l'algorithme est de détecter ce contour circulaire passant de façon relativement discontinue d'une valeur encodée sur huit bits à une autre valeur. Pour ce faire nous utilisons le filtre de "Sobel". Ce filtre est un opérateur couramment utilisé en traitement d'images pour la détection de contours. Il s'agit d'un des opérateurs les plus simples donnant des résultats corrects. L'opérateur calcule le gradient de l'intensité de chaque pixel par le biais d'une convolution entre l'opérateur et la matrice image. Cette opération renvoie une matrice de même taille que la matrice image contenant comme information la direction de la plus forte variation de luminosité et le taux de changement dans cette direction. C'est une forme d'approximation du gradient de l'image initiale. Ensuite un masque binaire est appliqué sur le résultat de l'opération précédente. Cette opération consiste à créer une matrice booléenne de la taille de l'image, contenant la valeur 1 là où le gradient de l'image (obtenue avec l'opération précédente) est maximal et 0 ailleurs. La figure 13(b) illustre le résultats de ces deux étapes.

On voit que des pixels "parasites" sont affectés de la valeurs 1 sur la matrice booléenne. Afin de remédier à ce problème , on va effectuer une opération de nettoyage sur cette matrice. Cette opération consiste à assigner la valeur 0 à l'image booléenne, à tous les pixels possédant la valeur 1 et constituant un ensemble connecté dont le nombre d'éléments est inférieur à une valeur seuil. La valeur seuil est choisie égale à 15. Le résultat de cette opération est illustré sur la figure 13(c).

Après ces étapes, nous obtenons une matrice booléenne propre contenant un ensemble de pixel affectés de la valeur 1. L'opération suivante consiste à déterminer le cercle moindres carrés passant par cet ensemble de points. Soit n le nombre de points $P_i = (x_i, y_i)$ on cherche

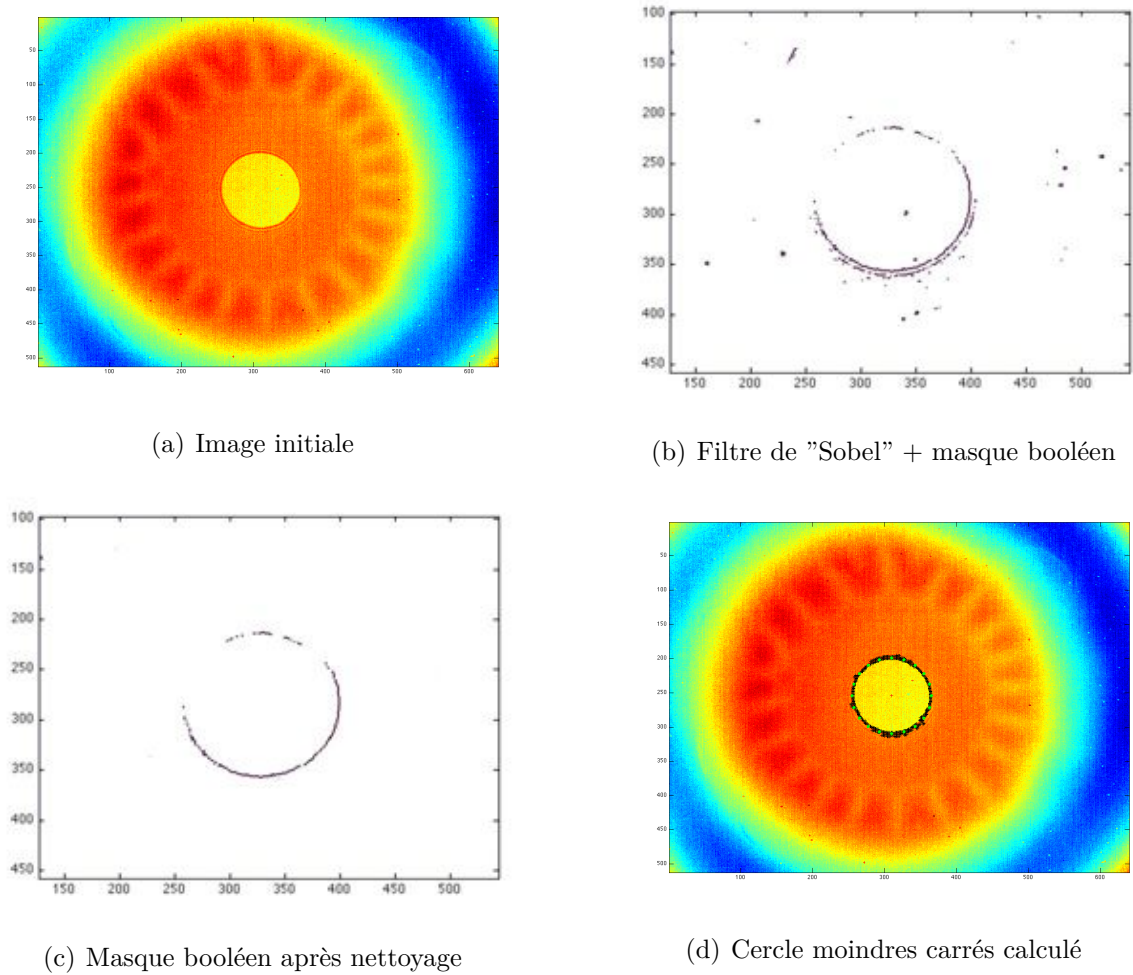


FIGURE 13 – Etapes de l'algorithme de traitement d'images

les coefficients c_1, c_2, c_3 minimisant l'expression suivante :

$$\sum_{i=1}^n \left((x_i^2 + y_i^2) + c_1 x_i + c_2 y_i + c_3 \right)^2 \quad (39)$$

Le centre du cercle $C = \left(\frac{-c_1}{2}; \frac{-c_2}{2} \right)$ et le rayon $r = \sqrt{\frac{c_1^2}{4} + \frac{c_2^2}{4} - c_3}$ sont obtenus en résolvant le système linéaire $Ac = B$ avec :

$$A = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i y_i & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i & \sum_{i=1}^n y_i^2 & \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n y_i & n \end{pmatrix}, B = - \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^3 + x_i y_i^2 \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 + x_i y_i^3 \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 + y_i^2 \end{pmatrix} \text{ et } c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \quad (40)$$

En pratique, la valeur du centre du cercle n'évolue pas au cours du processus d'évaporation. Ainsi, en appliquant cet algorithme sur chaque image issue de l'acquisition, on obtient

.1. ALGORITHME DE TRAITEMENT D'IMAGES POUR LA DÉTECTION DE LA POSITION DE LA

l'évolution du rayon de la zone sèche au cours du temps $r(t)$. Sur la figure 13(d), on représente en vert le cercle moindres carrés calculé à partir des points en noir issus de l'algorithme de traitement d'image. Cette évolution correspond à l'évolution de la position de la ligne triple au cours du temps. De cette évolution, on déduit la vitesse de ligne triple.

.2 Démonstration des formules de la méthode optique de reconstruction d'interface

.2.0.1 Formule calculant la position de la ligne triple

La démonstration qui suit vise à démontrer la formule suivante :

$$RLT = \frac{L(b + \frac{e}{n_{verre}})}{b + \frac{e}{n_{verre}} + c - e} \quad (41)$$

Les notations utilisées sont celles représentées sur la figure 2.4, l'indice de réfraction de la lame de verre sera noté n_{verre} . Afin d'obtenir une relation simple, on se place dans l'approximation des petits angles ce qui permet de linéariser les expressions.

Début de la démonstration :

$$\frac{RLT - (\epsilon - \beta)}{b} = \tan \theta$$

Avec l'approximation des petits angles, on a :

$$RLT = b\theta_1 + \epsilon + \beta$$

De plus,

$$\epsilon + \beta = e \cdot \tan \theta_2 \Leftrightarrow \epsilon + \beta = e\theta_2$$

Loi de Snell-Descartes :

$$\sin \theta_1 = n_{verre} \sin \theta_2$$

Avec l'approximation des petits angles on a donc :

$$\epsilon + \beta = \frac{e}{n_{verre}} \theta_1$$

Ainsi,

$$RLT = \theta_1(b + \frac{e}{n_{verre}}) \quad (42)$$

Or,

$$\tan \theta_1 = \theta_1 = \frac{L - RLT}{c - e}$$

.2. DÉMONSTRATION DES FORMULES DE LA MÉTHODE OPTIQUE DE RECONSTRUCTION D'I

Donc,

$$RLT = \frac{L - RLT}{c - e} \cdot \left(b + \frac{e}{n_{verre}}\right)$$

Conclusion,

$$RLT = \frac{L(b + \frac{e}{n_{verre}})}{b + \frac{e}{n_{verre}} + c - e}$$

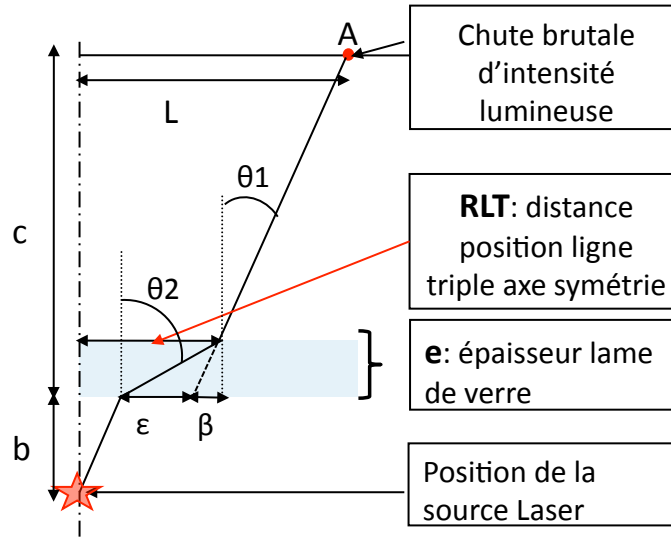


FIGURE 14 – Chemin lumineux du rayon le plus proche de la ligne triple

.2.0.2 Expression de l'angle de contact

La démonstration qui suit vise à démontrer la formule suivante :

$$\theta_{Contact} = \frac{\overline{AB}}{(n_{HFE7100} - 1) \left(H + \tan^2 \theta_{laser} + \overline{AB} \tan \theta_{laser} \right)} \cong \frac{\overline{AB}}{H (n_{HFE7100} - 1)} \quad (43)$$

Appliquons la loi de Snell-Descartes au niveau de l'interface fluide :

$$n_{HFE7100} \sin(\theta_{Contact} + \theta_{HFE7100}) = \sin(\theta_{Contact} + \theta_0)$$

Appliquons la loi de Snell-Descartes au niveau des interfaces du verre :

$$\begin{aligned} n_{HFE7100} \sin \theta_{HFE7100} &= n_{verre} \sin \theta_{verre} \\ n_{verre} \sin \theta_{verre} &= \sin \theta_{laser} \end{aligned}$$

Avec l'approximation des petits angles, on a :

$$\begin{aligned} \theta_{laser} &= n_{HFE7100} \theta_{HFE7100} \\ n_{HFE7100} (\theta_{Contact} + \theta_{HFE7100}) &= \theta_{Contact} + \theta_0 \\ \theta_{Contact} (n_{HFE7100} - 1) &= \theta_0 - \theta_{laser} \end{aligned}$$

et,

$$\overline{AB} = H(\tan \theta_0 - \tan \theta_{laser})$$

et,

$$\begin{aligned} \tan \theta_0 - \tan \theta_{laser} &= \tan(\theta_0 - \theta_{laser}) \cdot (1 + \tan \theta_0 \cdot \tan \theta_{laser}) \\ \tan \theta_0 - \tan \theta_{laser} &= \tan(\theta_0 - \theta_{laser}) \cdot \left(1 + \left(\tan \theta_{laser} + \frac{\overline{AB}}{H}\right) \cdot \tan \theta_{laser}\right) \end{aligned}$$

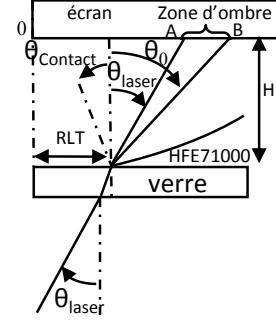
Dans l'approximation des petits angles, on a :

$$\frac{\overline{AB}}{H} = (\theta_0 - \theta_{laser}) \cdot \left(1 + \left(\tan \theta_{laser} + \frac{\overline{AB}}{H}\right) \cdot \tan \theta_{laser}\right)$$

Donc,

$$\theta_{Contact} (n_{HFE7100} - 1) \left(1 + \left(\tan \theta_{laser} + \frac{\overline{AB}}{H}\right) \tan \theta_{laser}\right) = \frac{\overline{AB}}{H}$$

Conclusion,



$$\theta_{Contact} = \frac{\overline{AB}}{(n_{HFE7100} - 1) \left(H + \tan^2 \theta_{laser} + \overline{AB} \tan \theta_{laser}\right)} \cong \frac{\overline{AB}}{H (n_{HFE7100} - 1)} \quad (44)$$

.2. DÉMONSTRATION DES FORMULES DE LA MÉTHODE OPTIQUE DE RECONSTRUCTION D'I

.2.0.3 Expression de θ_{Front}

La démonstration qui suit vise à démontrer la formule suivante :

$$\tan \theta_{Front}(x) = \frac{n_{HFE7100} \sin \left(\frac{\theta_{laser}(x)}{n_{HFE7100}} \right) - \sin \theta_{Screen}(x)}{\cos \theta_{Screen}(x) - n_{HFE7100} \cos \left(\frac{\theta_{laser}(x)}{n_{HFE7100}} \right)} \quad (45)$$

Appliquons la loi de Snell-Descartes au niveau de l'entrée et de la sortie de la lame de verre :

$$\sin \theta_{laser} = n_{verre} \sin \theta_{verre} = n_{HFE7100} \sin \theta_{HFE7100}$$

Donc dans l'approximation des petits angles, on a :

$$\theta_{HFE7100} = \frac{\theta_{laser}}{n_{HFE7100}}$$

Appliquons la loi de Snell-Descartes au niveau de l'interface :

$$\begin{aligned} n_{HFE7100} \sin (\theta_{HFE7100} + \theta_{Front}) &= \sin (\theta_{Front} + \theta_{Screen}) \\ \Leftrightarrow \\ n_{HFE7100} \sin \left(\frac{\theta_{laser}}{n_{HFE7100}} + \theta_{Front} \right) &= \sin (\theta_{Front} + \theta_{Screen}) \end{aligned}$$

Développons :

$$n_{HFE7100} \left(\sin \left(\frac{\theta_{laser}}{n_{HFE7100}} \right) \cos \theta_{Front} + \cos \left(\frac{\theta_{laser}}{n_{HFE7100}} \right) \sin \theta_{Front} \right) = \sin \theta_{Screen} \cos \theta_{Front} + \cos \theta_{Screen} \sin \theta_{Front}$$

Factorisons :

$$\sin \theta_{Front} \left(n_{HFE7100} \cos \left(\frac{\theta_{laser}}{n_{HFE7100}} \right) - \cos \theta_{Screen} \right) = \cos \theta_{Front} \left(\sin \theta_{Screen} - n_{HFE7100} \sin \left(\frac{\theta_{laser}}{n_{HFE7100}} \right) \right)$$

Conclusions :

$$\tan \theta_{Front}(x) = \frac{n_{HFE7100} \sin \left(\frac{\theta_{laser}(x)}{n_{HFE7100}} \right) - \sin \theta_{Screen}(x)}{\cos \theta_{Screen}(x) - n_{HFE7100} \cos \left(\frac{\theta_{laser}(x)}{n_{HFE7100}} \right)} \quad (46)$$

.3 Méthode de projection à balayage dichotomique

Dans cette méthode, on parcourt les éléments de l'ancienne interface en effectuant un balayage sur les paramètres de cet élément d'interface, on calcule la distance entre ce point de l'interface et celui du domaine. Enfin le point de l'interface ayant la plus petite distance est affecté au point du domaine.

La mise sous forme paramétrique des éléments revient à avoir une équation continue de la surface de l'élément sur le domaine élémentaire. Pour l'élément T6 (les triangles de l'interface), ceci est obtenu par variation continue des paramètres ξ et η sur les intervalles respectifs $[0, 1]$ et $[0, 1 - \xi]$.

Le balayage consiste à quadriller l'élément avec des valeurs discrètes de ces paramètres. Ainsi, on va calculer la distance que l'on cherche à minimiser en chacun des points de ce quadrillage. Il découle de ceci que la précision sur le minimum de la distance va dépendre du raffinement sur le quadrillage, c'est à dire du nombre de subdivisions que l'on fait sur les intervalles de ξ et η . En revanche, plus la résolution du quadrillage est fine, plus le nombre de test de distance pour la minimisation est important et diminue l'efficacité de l'algorithme. Pour palier à ce problème, on effectue un balayage dichotomique. Dans une première boucle, on balaye l'élément avec une faible résolution. Après avoir trouver un minimum, on balaye de nouveau, dans une seconde boucle, l'élément avec la même résolution mais sur une aire correspondant à un ordre de résolution supérieur par rapport à la première boucle. On peut répéter cette étape plusieurs fois, c'est ce qui est fait.

Ci dessous on démontre que la dichotomie génère moins d'opération qu'un balayage classique. La figure 15 illustre le principe de cette minimisation.

En référence à la figure 15, on peut exprimer l'erreur maximale faite par l'algorithme de minimisation sur la projection par la formule suivante :

Soit n le nombre de boucles sur le balayage

Soit k le nombre de subdivisions par boucle de balayage

Soit err_{max} l'erreur maximale faite sur la projection par rapport à la distance minimum réelle

$$err_{max} = |X_{minbalayage} - X_{min}| = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{h}{k^n} \quad (47)$$

Le nombre d'opérations N est défini par le produit :

$$N = n.k^2 \quad (48)$$

A la vue de cette équation, on constate que l'erreur de l'algorithme de minimisation décroît en $\frac{1}{k^n}$, or la fonction puissance étant prépondérante sur les fonctions affines, il s'en suit qu'à nombre d'opérations égales, on a intérêt d'avoir $n > k$.

Dans la démonstration qui suit, nous allons montrer qu'il existe une valeur optimale sur le nombre de subdivisions par boucle de balayage, la valeur k . Pour ce faire, nous allons, pour une erreur maximale fixée, exprimer le paramètre n correspondant au nombre de boucles sur le balayage en fonction de k .

Puis nous allons réexprimer le nombre d'opérations N en fonction de cette expression. Enfin

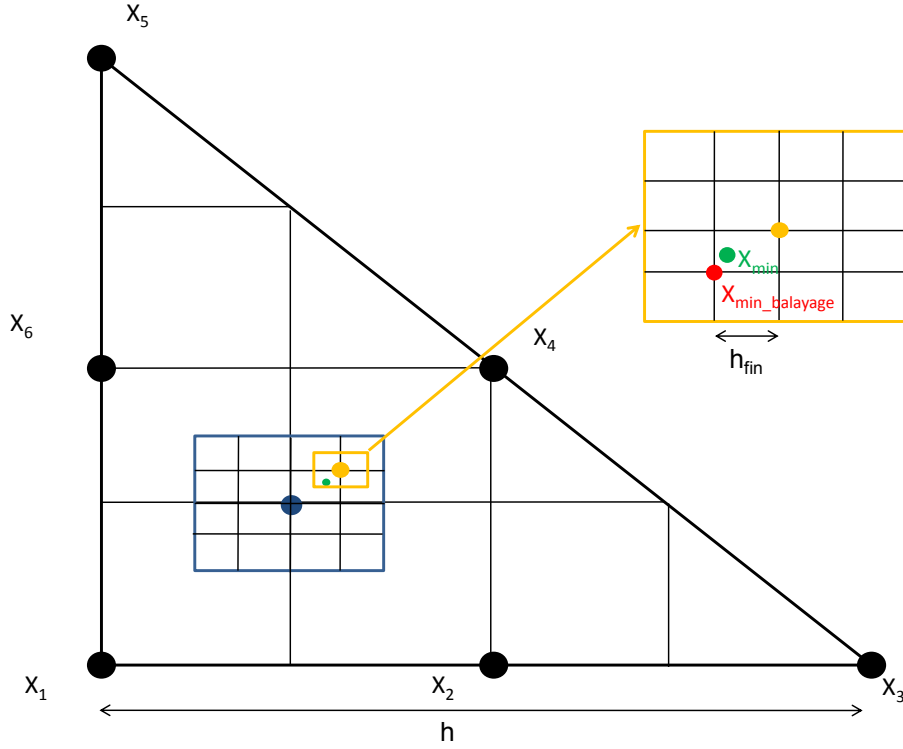


FIGURE 15 – Schéma de la méthode de minimisation

nous allons essayer de trouver si il y a une valeur de k minimisant le nombre d'opérations pour une valeur fixée de l'erreur maximale err_{max} .

L'expression 47 peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h} = k^n \Leftrightarrow n \cdot \ln k = -\ln \frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h} \quad (49)$$

Cela nous amène à l'expression suivante :

$$n = \frac{-\ln \frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h}}{\ln k} \quad (50)$$

En injectant l'expression 50 dans 48, on obtient :

$$N = \frac{-k^2 \ln \frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h}}{\ln k} \quad (51)$$

Dans cette expression et dans le cadre de notre étude $-\ln \frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h}$ est une constante. De plus, $err_{max} \ll h$ donc $\frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h} \ll 1$

Par conséquent,

$$\ln \frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h} < 0 \Rightarrow -\ln \frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h} > 0.$$

Conclusion $-\ln \frac{2 \cdot err_{max}}{\sqrt{2} \cdot h}$ est une constante positive. Ainsi, les variations du nombre d'opérations

ne dépendent pas de la valeur que l'on a fixée pour l'erreur maximale err_{max} et pas de la taille de maille caractéristique h .

On est donc ramené à l'étude de la fonction $N2 = \frac{k^2}{\ln k}$.

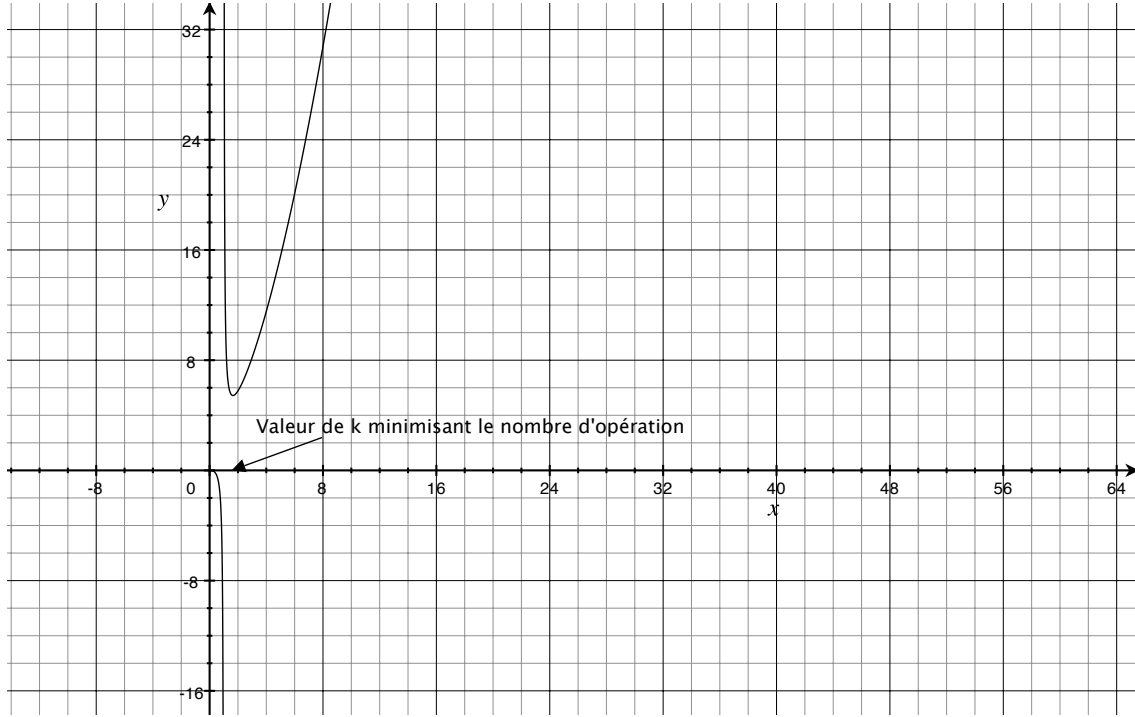


FIGURE 16 – $N2=f(k)$

Cherchons le minimum de cette expression :

$$\frac{\partial N2}{\partial k} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \frac{k^2}{\ln k}}{\partial k} = 0 \Leftrightarrow \frac{2k}{\ln k} - \frac{k}{(\ln k)^2} = 0 \Leftrightarrow k = e^{\frac{1}{2}} \cong 1.6487 \quad (52)$$

Conclusion, la valeur $k = 2$ semble optimiser le nombre d'opérations. Pour une erreur relative par rapport à la taille de maille ($\frac{err_{max}}{h}$) inférieure à 10^{-6} le nombre d'opérations est d'environ 75.

Bibliographie

- Ajaev, V.S. (2005), ‘Spreading of thin volatile liquid droplets on uniformly heated surfaces’, *Journal of Fluid Mechanics* **528**, 279–296. [74](#)
- Ajaev, V.S. and GM Homsy (2001), ‘Steady vapor bubbles in rectangular microchannels’, *Journal of colloid and interface science* **240**(1), 259–271. [74](#)
- Allain, C., D. Ausserre and F. Rondelez (1985), ‘A new method for contact-angle measurements of sessile drops’, *Journal of Colloid and Interface Science* **107**(1), 5–13. [34](#)
- Bigelow, WC, DL Pickett and WA Zisman (1946), ‘Oleophobic monolayers* 1 : : I. Films adsorbed from solution in non-polar liquids’, *Journal of Colloid Science* **1**(6), 513–538. [33](#)
- Bouffanaïs, R. (2007), Simulation of shear-driven flows : transition with a free surface and confined turbulence, PhD thesis, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). [107](#)
- Buguin, A., L. Vovelle and F. Brochard-Wyart (1999), ‘Shocks in inertial dewetting’, *Physical Review Letters* **83**(6), 1183–1186. [34](#)
- Bunner, B. and G. Tryggvason (2003), ‘Effect on bubble deformation on the properties of bubbly flows’, *Journal of Fluid Mechanics* **495**, 77–118. [106](#)
- Carneiro, B.P., C.T. Silva and A.E. Kaufman (1998), ‘Tetra-cubes : An algorithm to generate 3D isosurfaces based upon tetrahedra’. [122](#), [124](#)
- Chau, TT (2009), ‘A review of techniques for measurement of contact angles and their applicability on mineral surfaces’, *Minerals Engineering* **22**(3), 213–219. [33](#)
- Cheng, P., D. Li, L. Boruvka, Y. Rotenberg and AW Neumann (1990), ‘Automation of axisymmetric drop shape analysis for measurements of interfacial tensions and contact angles’, *Colloids and Surfaces* **43**(2), 151–167. [34](#)
- Chernyaev, E.V. (1995), ‘Marching cubes 33 : Construction of topologically correct isosurfaces’. [122](#)
- Chorin, A.J. (1980), ‘Flame advection and propagation algorithms’, *J. Comput. Physics* **35**, 1–11. [104](#)
- Colinet, P., H. Kaya, S. Rossomme and B. Scheid (2007), ‘Some advances in lubrication-type theories’, *The European Physical Journal-Special Topics* **146**(1), 377–389. [22](#), [74](#)

- DasGupta, S., J.A. Schonberg, I.Y. Kim, P.C. Wayner et al. (1993), ‘Use of the augmented Young-Laplace equation to model equilibrium and evaporating extended menisci’, *Journal of Colloid and Interface Science* **157**(2), 332–342. [74](#)
- Debar, R. (1974), ‘Fundamentals of the kraken code’, In *Technical report UCIR-760 Lawrence Livermore National Laboratory* . [103](#)
- Del Rio, OI, DY Kwok, R. Wu, JM Alvarez and AW Neumann (1998), ‘Contact angle measurements by axisymmetric drop shape analysis and an automated polynomial fit program1’, *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects* **143**(2-3), 197–210. [34](#)
- Di, Yana, Ruo Li, Tao Tang and Pingwen Zhang (2007), ‘Level set calculations for incompressible two-phase flows on a dynamically adaptive grid’, *J. Sci. Comput.* **31**(1-2), 75–98. [108](#)
- Diwakar, SV, S.K. Das and T. Sundararajan (2009), ‘A Quadratic Spline based Interface (QUASI) reconstruction algorithm for accurate tracking of two-phase flows’, *Journal of Computational Physics* **228**(24), 9107–9130. [104](#)
- Du, J., B. Fix, J. Glimm, X. Jia, X. Li, Y. Li and L. Wu (2006), ‘A simple package for front tracking’, *Journal of Computational Physics* **213**(2), 613–628. [105](#)
- Duraiswami, R. and A. Prosperetti (1992), ‘Orthogonal mapping in two dimensions’, *J. Comput. Physics* **98**, 254–268. [107](#)
- Dussan, Ramé and Garoff (1991), ‘On identifying the appropriate boundary conditions at a moving contact line : an experimental investigation’, *Journal of Fluid Mechanics* **230**, 97–116. [74](#)
- Dussan V, EB (1976), ‘The moving contact line : the slip boundary condition’, *Journal of Fluid mechanics* **77**(04), 665–684. [74](#)
- Dussan V, E.B. and S.H. Davis (1974), ‘On the motion of a fluid-fluid interface along a solid surface’, *Journal of Fluid Mechanics* **65**(01), 71–95. [74](#)
- Enright, D., R. Fedkiw, J. Ferziger and I. Mitchell (2002), ‘A hybrid particle level set method for improved interface capturing’, *Journal of Computational Physics* **183**(1), 83–116. [148](#)
- Esmaceli, A. and G. Tryggvason (1996), ‘An inverse energy cascade in 2-dimensional low reynolds number bubbly flows’, *J. Fluid Mech* **315**, 315–330. [106](#)
- Fabbro, M. Medale C. Xhaard R. (2007), ‘A thermo-hydraulic numerical model to study spot laser welding’, *C. R. Mecanique* **335**. [107](#)
- Fisher, L.R. (1979), ‘Measurement of small contact angles for sessile drops’, *Journal of Colloid and Interface Science* **72**(2), 200–205. [33](#)
- Fondecave, R. (1997), PhD thesis, Université Paris 6. [14](#)

- Fukai, J. (1993), ‘Modelling of the deformation of a liquid droplet impinging upon a flat surface’, *Phys. Fluids A* **5**. [107](#)
- Fukai, J. (1995), ‘Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a flat surface : Experiment and modeling’, *Phys. Fluids* **7**. [107](#)
- Glim, James, John Grove, Brent Lindquist, Oliver A. McBryan and Gretar Tryggvason (1988), ‘The bifurcation of tracked scalar waves’, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **9**(1), 61–79. [104](#), [105](#)
- Glimm, James, John W. Grove, X. L. Li and D. C. Tan (1999), ‘Robust computational algorithms for dynamic interface tracking in three dimensions’, *SIAM J. Sci. Comput.* **21**(6), 2240–2256. [105](#)
- Goodwin III, R.T. (1991), ‘A Investigation of a Viscous Coating Flow’. [34](#)
- Gouin, H. and S. Gavriluk (1999), ‘Wetting problem for multi-component fluid mixtures’, *Physica A : Statistical and Theoretical Physics* **268**(3-4), 291–308. [74](#)
- Guignard, S., O. A.Shawky, L. Tachon, K.M Abd-ElSalam and M. N Sabry (2010), Two-dimensional Front-Tracking model for Film Evaporation , *in* ‘Thermal Issues in Emerging Technologies, ThETA 3 , Cairo, Egypt, Dec 19-22nd 2010’, Vol. 1. [25](#)
- Hadjiconstantinou, N.G. (1999), ‘Hybrid atomistic-continuum formulations and the moving contact-line problem’, *Journal of Computational Physics* **154**(2), 245–265. [74](#)
- Harlow, F. and J.E. Welch (1965), ‘Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface’, *Physics of Fluids* **8**, 2182–2189. [103](#)
- Hegseth, J., A. Oprisan, Y. Garrabos, V.S. Nikolayev, C. Lecoutre-Chabot and D. Beysens (2005), ‘Wetting film dynamics during evaporation under weightlessness in a near-critical fluid’, *Physical Review E* **72**(3), 31602. [34](#)
- Hirt, C.W. and B.D. Nichols (1980), ‘Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries’, *J. Comput. Physics* **39**, 201–225. [104](#)
- Hocking, LM (1977), ‘A moving fluid interface. Part 2. The removal of the force singularity by a slip flow’, *Journal of Fluid Mechanics* **79**(02), 209–229. [74](#)
- Hunter, R.J. (2001), ‘Foundations of colloid science 2nd ed.’. [33](#)
- Höhmman, C. and P. Stephan (2002), ‘Microscale temperature measurement at an evaporating liquid meniscus’, *Experimental Thermal and Fluid Science* **26**(2-4), 157–162. [74](#), [75](#)
- Ibrahim, K., M.F. Abd Rabbo, T. Gambaryan-Roisman and P. Stephan (2010), ‘Experimental investigation of evaporative heat transfer characteristics at the 3-phase contact line’, *Experimental Thermal and Fluid Science* **34**(8), 1036 – 1041.
- URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6V34-4YMY702-3/2/c7235922d74e1015666b1fb59cd6b2c5> [75](#)

- J. Glimm X.-L. Li R. Menikoff D.H. Sharp, Q. Zhang (1990), ‘A numerical study of bubble interactions in rayleigh–taylor instability for compressible fluids’, *Phys. Fluids A* **2** **11**, 2046–1054. [105](#)
- Jansen, S. Nagrath K.J. and R.T. Lahey (2003), ‘Three dimensional simulation of incompressible two-phase flows using a stabilized finite element method and a level set approach’. [103](#)
- Johnson, MFG, RA Schluter and SG Bankoff (1997), ‘Fluorescent imaging system for global measurement of liquid film thickness and dynamic contact angle in free surface flows’, *Review of Scientific Instruments* **68**, 4097. [34](#)
- Juric, D. and G. Tryggvason (1998), ‘Computations of boiling flows’, *International Journal of Multiphase Flow* **24**, 387–410. [106](#)
- Lorensen, W.E. and H.E. Cline (1987), Marching cubes : A high resolution 3D surface construction algorithm, *in* ‘Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques’, ACM, pp. 163–169. [111](#), [120](#)
- M. R. Nobari, Y.-J. Jan and G. Tryggvason (1996), ‘Head on collision of drops—a numerical investigation’, *Phys. Fluids* **8**, 19–42. [106](#)
- Magnaudet, D. Legendre J. and G. Mougin (2003), ‘Hydrodynamic interaction between two spherical bubbles rising side by side in a viscous liquid’, *Journal of Fluid Mechanics* **497**, 133–166. [107](#)
- Mathieu (2003), ÉTUDES PHYSIQUE, EXPÉRIMENTALE ET NUMÉRIQUE DES MÉCANISMES DE BASE INTERVENANT DANS LES ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES EN MICRO-FLUIDIQUE., PhD thesis, Université de Provence. [19](#), [22](#), [74](#)
- Min, C. and F. Gibou (2007), ‘A second order accurate level set method on non-graded adaptive cartesian grids’, *Journal of Computational Physics* **225**(1), 300–321. [103](#)
- Moosman, S. and GM Homsy (1980), ‘Evaporating menisci of wetting fluids’, *Journal of colloid and interface science* **73**(1), 212–223. [74](#)
- Morris, SJS (2001), ‘Contact angles for evaporating liquids predicted and compared with existing experiments’, *Journal of Fluid Mechanics* **432**, 1–30. [74](#)
- Moy, E., P. Cheng, Z. Policova, S. Treppo, D. Kwok, DP Mack, PM Sherman and AW Neuman (1991), ‘Measurement of contact angles from the maximum diameter of non-wetting drops by means of a modified axisymmetric drop shape analysis’, *Colloids and Surfaces* **58**(3), 215–227. [34](#)
- Nas, S. and G. Tryggvason (1993), ‘Computational investigation of thermal migration of bubbles and drops’, *Fluid Mechanics Phenomena in Microgravity* **AMD 174/FED 175**, 71–83. [106](#)

- Natarajan, B.K. (1994), ‘On generating topologically consistent isosurfaces from uniform samples’, *The Visual Computer* **11**(1), 52–62. [122](#)
- Newman, T.S. and H. Yi (2006), ‘A survey of the marching cubes algorithm’, *Computers & Graphics* **30**(5), 854–879. [120](#)
- Nielson, G.M. and B. Hamann (1991), The asymptotic decider : resolving the ambiguity in marching cubes, in ‘Proceedings of the 2nd conference on Visualization’91’, IEEE Computer Society Press, p. 91. [122](#)
- Occelli, N. Lock M. Jaeger M. Medale R. (1998), ‘Local mesh adaptation technique for front tracking problems’, *International Journal of Numerical Methods in Fluids* **28**, 719–736. [108](#)
- Osher, S. and J.A. Sethian (1988), ‘Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations’, *J. Comput. Physics* **79**, 12–49. [103](#)
- Panchamgam, S.S., A. Chatterjee, J.L. Plawsky and P.C. Wayner Jr (2008), ‘Comprehensive experimental and theoretical study of fluid flow and heat transfer in a microscopic evaporating meniscus in a miniature heat exchanger’, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **51**(21-22), 5368–5379. [34](#), [75](#)
- Peskin, C.S. (1977), ‘Numerical analysis of blood flow in the heart’, *J. Comput. Phys* **25**, 220–252. [105](#)
- Pilliod, J.E. et al. (2004), ‘Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces* 1’, *Journal of Computational Physics* **199**(2), 465–502. [104](#)
- Pomeau, Y. (2002), ‘Recent progress in the moving contact line problem : a review’, *Comptes Rendus Mecanique* **330**(3), 207–222. [74](#)
- Proudman, I. and M. Asadullah (1988), ‘Steady viscous flow near a stationary contact line’, *Journal of Fluid Mechanics* **187**, 35–43. [74](#)
- Rednikov, A.Y., S. Rossomme and P. Colinet (2009), ‘Steady microstructure of a contact line for a liquid on a heated surface overlaid with its pure vapor : Parametric study for a classical model’, *Multiphase Science and Technology* **21**(3). [22](#), [74](#)
- Renk, FJ and PC Wayner Jr (1979a), ‘An Evaporating Ethanol Meniscus—Part I : Experimental Studies’, *Journal of Heat Transfer* **101**, 55. [75](#)
- Renk, FJ and PC Wayner Jr (1979b), ‘An Evaporating Ethanol Meniscus—Part II : Analytical Studies’, *Journal of Heat Transfer* **101**, 59. [23](#), [74](#)
- Richtmyer, R. and K. Morton (1967), Difference methods for initial value problems, in ‘Interscience’, New York. [104](#)

- Rio, E., A. Daerr and L. Limat (2004), ‘Probing with a laser sheet the contact angle distribution along a contact line’, *Journal of colloid and interface science* **269**(1), 164–170. [34](#)
- Rivero, J. Magnaudet M. and J. Fabre (1995), ‘Accelerated flows around a rigid sphere or a spherical bubble. part 1 : Steady straining flow’, *Journal of Fluid Mechanics* **289**, 97–136. [107](#)
- R.L. Holmes, J.W. Grove, D.H. Sharp (1995), ‘Numerical investigation of richtmyer–meshkov instability using front tracking’, *J. Fluid Mech* **301**, 51–64. [105](#)
- Rodriguez-Valverde, MA, MA Cabrerizo-Vilchez, P. Rosales-Lopez, A. Paez-Duenas and R. Hidalgo-Alvarez (2002), ‘Contact angle measurements on two (wood and stone) non-ideal surfaces’, *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects* **206**(1-3), 485–495. [34](#)
- Rotenberg, Y., L. Boruvka and AW Neumann (1983), ‘Determination of surface tension and contact angle from the shapes of axisymmetric fluid interfaces’, *Journal of colloid and interface science* **93**(1), 169–183. [34](#)
- Scheid, B., O. Kabov, C. Minetti, P. Colinet and J.C. Legros (2000), Measurement of free surface deformation by reflectance-Schlieren method, in ‘Proc. 3rd Eur. Conf. Heat Mass Transfer, Heidelberg’. [34](#)
- Serin (2007), Etude hydrodynamique et thermique de la vaporisation dans un micro-canal de section carrée : application aux micro-boucles diphasiques à pompage capillaire., PhD thesis, Université Toulouse III. [19](#)
- Shi, Z. Chen, T. Tang and D. Yu (2005), ‘Moving mesh methods for computational fluid dynamics’, *Contemporary Mathematics* **383**. [107](#)
- Shin, Seungwon and Damir Juric (2002), ‘Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity’, *J. Comput. Phys.* **180**(2), 427–470. [106](#)
- Shin, Seungwon, S. I. Abdel-Khalik, Virginie Daru and Damir Juric (2005), ‘Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method’, *J. Comput. Phys.* **203**(2), 493–516. [106](#)
- Skinner, F. K., Y. Rotenberg and A. W. Neumann (1989), ‘Contact angle measurements from the contact diameter of sessile drops by means of a modified axisymmetric drop shape analysis’, *Journal of Colloid and Interface Science* **130**(1), 25 – 34.
URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6WHR-4CX6V6D-3H/2/c93a67e6ed96150779e7e036dfc98c3b> [34](#)
- Smereka, M. Sussman P. and S. Osher (1994), ‘A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow’, *J. Comput. Physics* **114**, 146–159. [103](#)

- Spelt, JK, Y. Rotenberg, DR Absolom and AW Neumann (1987), ‘Sessile-drop contact angle measurements using axisymmetric drop shape analysis’, *Colloids and Surfaces* **24**(2-3), 127–137. [34](#)
- Stephan and Hammer (1994), ‘A new model for nucleate boiling heat transfer’, *Wärme und Stoffübertragung* **30**, 119–125. [22](#), [74](#)
- Stephan, PC and CA Busse (1992), ‘Analysis of the heat transfer coefficient of grooved heat pipe evaporator walls’, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **35**(2), 383–391. [74](#)
- Sussman, M. and P. Smereka (1997), ‘Axisymmetric free boundary problems’, *Journal of Fluid Mechanics* **341**, 269–294. [103](#)
- Torres, D. J. and J. U. Brackbill (2000), ‘The point-set method : front-tracking without connectivity’, *J. Comput. Phys.* **165**(2), 620–644. [106](#)
- Toutant, A. (2006), Modélisation physique des interactions entre interfaces et turbulence, PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. [106](#)
- Unverdi, S. and G. Tryggvason (1992), ‘A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows’, *J. Comput. Physics* **100**, 25–37. [105](#), [106](#)
- Van Gelder, A. and J. Wilhelms (1994), ‘Topological considerations in isosurface generation’, *ACM Transactions on Graphics (TOG)* **13**(4), 337–375. [122](#)
- Vincent, S., G. Balmigère, J.P. Caltagirone and E. Meillot (2010), ‘Eulerian-Lagrangian multiscale methods for solving scalar equations-Application to incompressible two-phase flows’, *Journal of Computational Physics* **229**(1), 73–106. [109](#)
- Wayner, P.C. et al. (2002), ‘Nucleation, growth and surface movement of a condensing sessile droplet’, *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects* **206**(1-3), 157–165. [34](#)
- Xu, E. George J. Glimm X.L. Li A. Marchese Z.L. (2002), ‘A comparison of experimental, theoretical, and numerical simulation rayleigh–taylor mixing rates’, *Proc. Natl. Acad. Sci* **99**, 2587–2592. [105](#)
- Zeng, J. Glimm J.W. Grove X.L. Li K. Shyue Y. and Q. Zhang (1998), ‘Three-dimensional front tracking’, *SIAM J. Sci. Comput* **19**, 703–727. [105](#)

Développement d'outils numériques et expérimentaux dédiés à l'étude de l'évaporation en présence de ligne triple

Résumé Les travaux réalisés au cours de cette thèse visent à apporter une aide à la compréhension des mécanismes régissant l'évaporation des films liquides. La physique des problèmes à changement de phase avec ligne de contact est gouvernée par des mécanismes agissant au niveau de ces dernières ainsi qu'au niveau des interfaces gaz-liquide. La description géométrique des interfaces est donc un point clef dans cette étude tant d'un point de vue numérique qu'expérimental. Un outil numérique tridimensionnel de suivi d'interface infiniment fine a été créé afin d'anticiper la simulation numérique de ces problèmes. Cet algorithme repose sur une description quadratique de l'interface qui est une surface du maillage. L'ordre de convergence de cette méthode relatif à différentes caractéristiques (courbure, normale, position) de l'interface ainsi que sa qualité conservative ont été étudiés.

Parallèlement à cette approche numérique, une technique expérimentale d'inversion optique a été développée. Celle-ci permet la mesure dynamique du profil d'une interface au voisinage de la ligne de contact dans le cadre de fluide très mouillant.

Cette méthode, appliquée dans le cadre d'un problème de film en évaporation quasi axisymétrique a permis, dans le cadre d'une expérience simple, une première quantification des flux de chaleur et de masse échangés au niveau de la ligne de contact.

Mots-clés : ligne de contact, changement de phase, évaporation, interface, angle de contact, front-tracking, maillage mobile, suivi d'interface.

Numerical and experimental tools development to study evaporation with contact line problem

Abstract The tasks fulfilled during this study aim at providing tools for understanding the mechanisms of liquid film evaporation. Evaporation in the presence of a triple lines is ruled by physical mechanisms acting on these singularities as well as on the gas liquid interfaces. Thus, the interface description, under it numerical as experimental aspects, is a key point of this study.

A numerical tridimensionnal sharp interface tracking tool has been developed to be used in further numerical simulation of the evaporation problem. In this algorithm, the interface is described as a quadratic grid surface. Its convergence orders relatively to geometrical parameters of the interface (curvature, normal, position) has been studied.

In the mean time, an experimental optical inversion technique has been developed and validated. It allows a dynamic measurement of the interface shape in the vicinity of the triple line of highly wetting fluid. This method has been applied to the case of a quasi axisymmetric evaporating film and provides a first quantification of the heat and mass transfers generated by the triple line region.

Keyword : contact line, phase change, evaporation, interface, contact angle, front-tracking, moving-mesh.